

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Институт природных ресурсов

Направление подготовки Химическая технология

Кафедра Химической технологии топлива и химической кибернетики

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Тема работы	
Моделирование и оптимизация процесса облагораживания бензинов на цеолитных катализаторах	

УДК 665.642.5

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ4Б	Романенкова Вера Вадимовна		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент кафедры ХТТ и ХК	Самборская Марина Анатольевна	к.т.н., доцент		

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент кафедры Менеджмента	Криницына Зоя Васильевна	к.т.н., доцент		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент кафедры ЭБЖ	Чулков Николай Александрович	к.т.н., доцент		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Зав. кафедрой	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
ХТТ и ХК	Юрьев Егор Михайлович	к.т.н., доцент		

Планируемые результаты обучения по ООП

Код результата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)
Профессиональные компетенции	
P1	Применять глубокие естественно – научные, математические и инженерные знания для создания новых материалов
P2	Применять глубокие знания в области современных технологий химического производства для решения междисциплинарных инженерных задач
P3	Ставить и решать инновационные задачи инженерного анализа, связанные с созданием материалов и изделий, и использованием системного анализа и моделирования объектов, и процессов химической технологии
P4	Разрабатывать химико – технологические процессы, проектировать и использовать новое оборудование для создания материалов, конкурентоспособных на мировом рынке
P5	Проводить теоретические и экспериментальные исследования в области создания новых материалов, современных химических технологий, нанотехнологий
P6	Внедрять, эксплуатировать современные высокотехнологичные линии автоматизированного производства, обеспечивать их высокую эффективность, соблюдать правила охраны здоровья и безопасности труда на химическом производстве, выполнять требования по защите окружающей среды
Универсальные компетенции	
P7	Активно владеть иностранным языком на уровне, позволяющем работать в иноязычной среде, разрабатывать документацию, презентовать и защищать результаты инновационной инженерной деятельности
P8	Использовать глубокие знания по проектному менеджменту для ведения инновационной инженерной деятельности с учетом юридических аспектов защиты интеллектуальной собственности
P9	Эффективно работать индивидуально, в качестве члена и руководителя группы, состоящей из специалистов различных направлений и квалификаций, демонстрировать ответственность за результаты работы и готовность следовать корпоративной культуре организации
P10	Самостоятельно учиться и непрерывно повышать квалификацию в течение всего периода профессиональной деятельности
P11	Демонстрировать глубокие знания социальных, этических и культурных аспектов инновационной инженерной деятельности, компетентность в вопросах устойчивого развития

Министерство образования и науки Российской Федерации
 Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
 высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
 ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Институт природных ресурсов

Направление подготовки (специальность) Химическая технология

Кафедра Химической технологии топлива и химической кибернетики

УТВЕРЖДАЮ:

Зав. кафедрой

 (Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ

на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

Магистерской диссертации

(бакалаврской работы, дипломного проекта/работы, магистерской диссертации)

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ4Б	Романенковой Вере Вадимовне

Тема работы:

Моделирование и оптимизация процесса облагораживания бензинов на цеолитных катализаторах	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	09.03.2016 №1750

Срок сдачи студентом выполненной работы:	01.06.2016
--	------------

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

<p>Исходные данные к работе</p> <p><i>(наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).</i></p>	<p>Сырье, продукты и технологическая схема установки «Цеоформинг» мощностью 30 тыс.т./год</p>
---	---

<p>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов</p> <p><i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</i></p>	<p>Цель работы – моделирование реактора и блока фракционирования продуктов цеоформинга.</p> <p>Литературный обзор:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Актуальность применения цеолитсодержащих катализаторов для облагораживания бензинов; 2. Аналитический обзор схем превращения и кинетических параметров реакций углеводородов на цеолитсодержащих катализаторах; 3. Технология процесса цеоформинга; 4. Конструктивные особенности реакторов для облагораживания углеводородов. <p>Экспериментальная часть:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Моделирование реактора цеоформинга в HYSYS. Оптимизация размеров и режимных параметров работы. Разработка конструкции реактора; 2. Моделирование и оптимизация блока фракционирования продуктов в HYSYS; 3. Анализ результатов, выводы и рекомендации.
<p>Перечень графического материала</p> <p><i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i></p>	<p>Технологическая схема процесса цеоформинга, конструкция реактора</p>
<p>Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы <i>(с указанием разделов)</i></p>	
<p>Раздел</p>	<p>Консультант</p>
<p>Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение</p>	<p>Криницына Зоя Васильевна</p>
<p>Социальная ответственность</p>	<p>Чулков Николай Александрович</p>
<p>Литературный обзор на иностранном языке</p>	<p>Сыскина Анна Александровна</p>
<p>Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:</p>	
<p>Литературный обзор</p>	

<p>Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику</p>	<p>10.03.2016</p>
--	-------------------

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент кафедры ХТТ и ХК	Самборская Марина Анатольевна	к.т.н., доцент		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ4Б	Романенкова Вера Вадимовна		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ4Б	Романенковой Вере Вадимовне

Институт	ИПР	Кафедра	ХТТ и ХК
Уровень образования	Магистрант	Направление/специальность	Химическая технология

Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:

1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	Стоимость компьютерного оборудования 30000 рублей, базовый оклад работников НИИ ТПУ для доцента, к.т.н. 23264, 86 рублей, для ассистентов 14584,32 рубля
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	-
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	Страховые взносы в размере 30%, ставка отчислений во внебюджетные фонды 27,1%

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Оценка коммерческого и инновационного потенциала НТИ	Оценка готовности проекта к коммерциализации, выбор метода коммерциализации для разработанной модели реактора и узла фракционирования в среде HYSYS
2. Разработка устава научно-технического проекта	Постановка целей и результатов разработанного проекта, выявление заинтересованных лиц, формирование организационной структуры проекта
3. Планирование процесса управления НТИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок	Определение контрольных событий проекта, составление плана проекта, формирование бюджета НТИ
4. Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности	Определение сравнительной эффективности разработки модели реакторного блока и узла фракционирования установки "Цеоформинг" в среде HYSYS в сравнении с аналогами, выполненными в среде PROII и PetroSim

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. «Портрет» потребителя результатов НТИ
2. Сегментирование рынка
3. Оценка конкурентоспособности технических решений
4. Матрица SWOT
5. График проведения и бюджет НТИ
6. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НТИ

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	16.03.2016
--	------------

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Креницына Зоя Васильевна	к.т.н., доцент		16.03.2016

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ4Б	Романенкова Вера Вадимовна		16.03.2016

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ4Б	Романенковой Вере Вадимовне

Институт	ИПР	Кафедра	ХТТ и ХК
Уровень образования	Магистрант	Направление/специальность	Химическая технология

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

<p>1. Описание рабочего места (рабочей зоны, технологического процесса, механического оборудования) на предмет возникновения:</p> <ul style="list-style-type: none"> – вредных проявлений факторов производственной среды (метеоусловия, вредные вещества, освещение, шум, вибрации, электромагнитные поля) – опасных проявлений факторов производственной среды (механической природы, термического характера, электрической, пожарной и взрывной природы) – негативного воздействия на окружающую природную среду (атмосферу, гидросферу, литосферу) – чрезвычайных ситуаций (техногенного, стихийного, экологического и социального характера) 	<p>Рабочим местом является производственная площадка установки процесса "Цеоформинг". Конечным потребителем результата научно – исследовательской работы является оператор, который с применением разработанной модели может производить изменение технологических характеристик процесса и отслеживать возможные результаты и последствия на модели, что уменьшает риски возникновения неконтролируемых опасных и чрезвычайных ситуаций на производстве, и, как следствие, травмирования работников и аварий.</p>
<p>2. Знакомство и отбор законодательных и нормативных документов по теме</p>	<p>Генеральное соглашение между общероссийскими объединениями профсоюзов, общероссийскими объединениями работодателей и Правительством Российской Федерации на 2014 – 2016 годы. ГН 2.1.6.1338 – 03 "Предельно допустимые концентрации (ПДК) загрязняющих веществ в атмосферном воздухе населенных мест"; Постановление Главного государственного санитарного врача РФ от 17.06.2014 г. № N 37. Постановление Российской Федерации от 10 апреля 2003 г. № 38 "О введении в действие СанПин 2.2.1 / 2.1.1.1200 – 03 "Санитарно – защитные зоны и санитарная классификация предприятий, сооружений и иных объектов"".</p>

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

<p>1. Анализ выявленных вредных факторов проектируемой производственной среды в следующей последовательности:</p> <ul style="list-style-type: none"> – физико-химическая природа вредности, её связь с разрабатываемой темой; – действие фактора на организм человека; – приведение допустимых норм с необходимой размерностью (со ссылкой на соответствующий нормативно-технический документ); – предлагаемые средства защиты (сначала коллективной защиты, затем – индивидуальные защитные средства) 	<p>Химические вещества, участвующие в разрабатываемой модели: бензин, цеолитсодержащий катализатор. Пути действия на человека: дыхательная, пищеварительная системы, кожные покровы. Средства защиты: герметизация всего оборудования, защита органов дыхания, кожи</p>
<p>2. Анализ выявленных опасных факторов проектируемой производственной среды в следующей последовательности</p> <ul style="list-style-type: none"> – механические опасности (источники, средства защиты); – термические опасности (источники, средства 	<p>Движущие механизмы для перемещения перерабатываемой среды – насосы. Также аппараты характеризуются большими размерами. Защита – соблюдение технического регламента по эксплуатации, системы планово –</p>

<p>защиты);</p> <ul style="list-style-type: none"> – электробезопасность (в т.ч. статическое электричество, молниезащита – источники, средства защиты); – пожаровзрывобезопасность (причины, профилактические мероприятия, первичные средства пожаротушения) 	<p>предупредительного ремонта (ППР), применение ограждений и блокировочных устройств. Температура процесса 360 – 460°C. Защита – применение теплоизоляционных материалов, теплоотражающих и теплопоглощающих экранов. Наличие исправного оборудования. Защита – изоляция токоведущих частей, установка оградительных устройств, предупредительная сигнализация, предупреждающие плакаты, защитное заземление, зануление; применение специального покрытия для полов (в случае защиты от статического электричества). Проведение периодических инструктажей по пожарной безопасности, курение в строго отведенных местах, герметизация оборудования, организация эффективной вентиляции. Ограничение пожара – применение огнетушителей средств (водяные гидранты, пеногенераторы, песок, кошма и тд).</p>
<p>3. Охрана окружающей среды:</p> <ul style="list-style-type: none"> – анализ воздействия объекта на атмосферу (выбросы); – анализ воздействия объекта на гидросферу (сбросы); – анализ воздействия объекта на литосферу (отходы) 	<p>Выбросы от технологических (углеводородов) и вентиляционных установок. Сбросы воды от санитарно – бытовых и ремонтных работ (гидравлические испытания). Твердые отходы производства (отработанный катализатор, катализаторная пыль, неисправные детали и узлы установок)</p>
<p>4. Защита в чрезвычайных ситуациях:</p> <ul style="list-style-type: none"> – перечень возможных ЧС на объекте; – выбор наиболее типичной ЧС; – разработка превентивных мер по предупреждению ЧС; – разработка мер по повышению устойчивости объекта к данной ЧС; – разработка действий в результате возникшей ЧС и мер по ликвидации её последствий 	<p>Возможные ЧС: прекращение подачи сырья; прекращение подачи электроэнергии; нарушение герметичности соединений трубопроводов, аппаратов или их разрыв; неисправность средств контроля и автоматики. Наиболее типичные ЧС – это пожары и взрывы.</p>
<p>5. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности:</p> <ul style="list-style-type: none"> – специальные (характерные для проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны 	<p>Федеральный закон Российской Федерации от 28 декабря 2013 г. N 426-ФЗ "О специальной оценке условий труда"</p> <p>Федеральный закон Российской Федерации от 28 декабря 2013 г. № 421 – ФЗ о внесении изменений в отдельные законодательные акты РФ в связи с принятием Федерального закона "О специальной оценке условий труда"</p>
Перечень графического материала:	
	Схема санитарно – защитной зоны

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	19.03.2016
---	-------------------

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Чулков Николай Александрович	к.т.н., доцент		19.03.2016

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ4Б	Романенкова Вера Вадимовна		19.03.2016

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА ВКР,
ВЫПОЛНЕННОГО НА ИНОСТРАННОМ ЯЗЫКЕ**

Раздел 1
Литературный обзор

Студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ4Б	Романенкова Вера Вадимовна		

Консультант кафедры ХТТ и ХК ИПР:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент кафедры ХТТ и ХК	Самборская Марина Анатольевна	к.т.н., доцент		

Консультант – лингвист кафедры ИЯПР:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент кафедры ИЯПР	Сыскина Анна Александровна	к.ф.н., доцент		

Реферат

Выпускная квалификационная работа 110с., 41 рис., 36 табл., 60 источников, 4 прил.

Ключевые слова: цеоформинг, прямогонный бензин, цеолитсодержащий катализатор, схема превращения углеводородов, кинетические параметры реакций, оптимизация, модель реактора, модель узла фракционирования, программное обеспечение HYSYS Aspen Tech.

Объектом исследования является процесс облагораживания бензиновых фракций в схеме процесса цеоформинг, т.е. реактора и узла фракционирования.

Цель работы – моделирование и оптимизация реакторного блока и узла фракционирования для процесса облагораживания углеводородов на цеолитсодержащих катализаторах, расчет оптимальных конструктивных размеров реактора. В процессе исследования использовалась: моделирующая система HYSYS Aspen Tech для моделирования и оптимизации процесса.

В результате исследования была сформирована целевая функция в безразмерной форме, на основании чего предложена конструкция реактора и выбран оптимальный температурный режим при работе на максимальный выход или на максимальное октановое число продукта. Также получены оптимальные параметры работы ректификационной колонны, позволяющие получить бензины с характеристиками, соответствующими требованиям ГОСТ 51866 – 2002.

Область применения: результаты данной работы могут быть использованы для проектирования новых и оптимизации действующих установок облагораживания углеводородов на цеолитах, т.к. получение продуктов с высокой стоимостью и с меньшими капитальными и эксплуатационными затратами является одной из важных задач каждой конкурентно способной компании.

Следующий этап работы процесса – проведение эксперимента для уточнения кинетических параметров реакций и схемы превращения.

Определения

В данной работе применены следующие термины с соответствующими определениями:

цеолитный катализ: процесс получения высокооктановых бензинов из прямогонных бензиновых фракций на цеолитсодержащих катализаторах.

облагораживание бензиновых фракций: химический процесс повышения октанового числа.

цеолитсодержащий катализатор: каркасные кристаллические алюмосиликаты, имеющие общую формулу $Me_{x/n}[(AlO_2)_x(SiO_2)_y] \cdot mH_2O$.

математическое моделирование: метод, позволяющий изучать свойства объектов на математической модели, осуществлять компьютерное прогнозирование оптимальных схем и режимов эксплуатации промышленных установок для сокращения количества стадий масштабного перехода.

обратная кинетическая задача: задача, при решении которой по известному набору протекающих реакций определяются кинетические параметры.

критерии оптимизации: параметры, позволяющие сформировать целевую функцию (октановое число и относительный выход бензина).

Обозначения, сокращения

В данной работе применены следующие обозначения и сокращения:

УВ – углеводороды;

ЦСК – цеолитсодержащий катализатор;

ОЧ – октановое число;

ИМ – исследовательский метод;

ММ – моторный метод;

НПЗ – нефте – перерабатывающий завод;

РБ – реакторный блок;

РИС – реактор идеального смешения;

РИВ – реактор идеального вытеснения;

ЦК – целевой компонент;

НТО НПЦ “Ноосфера” – Научно – технический отдел Научно – производственного центра “Ноосфера”;

НИР – научно – исследовательская работа;

СО – социальная ответственность;

ЭЧ – экономическая часть;

НИ – научное исследование;

ПДК – предельно – допустимая концентрация;

ППР – планово – предупредительный ремонт;

СЗЗ – санитарно – защитная зона;

ЧС – чрезвычайные ситуации.

Нормативные ссылки

В данной работе использованы ссылки на следующие стандарты:

1. ГОСТ 12.1.005 – 89. Общие санитарно – гигиенические требования к воздуху рабочей зоны. Поправка к ГОСТ 12.1.005 – 88 от 01.04.2004 [Текст]. – Взамен ГОСТ 12.1.005 – 76. – М: Стандартиформ, 2008. – 50 с.
2. Строительные нормы и правила СНиП 23 – 03 – 2003. Защита от шума. [Текст]. – М: Стандартиформ, 2004. – 25 с.
3. ГОСТ 12.1.012 – 2004. Система стандартов безопасности труда. Вибрационная безопасность. Общие требования. Поправка от 01.07.2009 [Текст]. – М: Стандартиформ, 2010. – 23 с.
4. ГОСТ 12.1.029 – 80. Средства и методы защиты от шума. Классификация. [Текст]. – М: Стандартиформ, 1998. – 3 с.
5. ГОСТ Р 55059 – 2012. Безопасность в чрезвычайных ситуациях. Менеджмент риска чрезвычайной ситуации. Термины и определения [Текст]. – Москва: Стандартиформ, 2014 – 8 с.
6. ГОСТ Р 12.1.009 – 2009. Электробезопасность. Термины и определения.– М. – Из-во стандартов. – 16 с.
7. ГОСТ 51866 – 2002. Топлива моторные. Бензин неэтилированный. Технические условия.

Содержание

Введение.....	16
1 Литературный обзор	21
1. 1 Аналитический обзор схем превращения и кинетических параметров реакций УВ на ЦСК	21
1. 2 Технология процесса цеоформинга.....	27
1. 3 Конструктивные особенности реакторов для облагораживания УВ.....	32
2. Объект и методы исследования	38
3 Расчетная часть.....	40
3. 1 Расчет термодинамических параметров реакций	40
3. 2 Формирование схемы превращений	42
3. 3 Подбор кинетических параметров	42
3. 4 Предварительный расчет реактора облагораживания УВ на ЦСК.....	50
3. 4. 1 Материальный баланс.....	50
3. 4. 2 Тепловой баланс.....	53
3. 4. 3 Определение геометрических размеров реактора	57
3. 4. 4 Конструктивное оформление реактора.....	58
3. 5 Проверка модели на адекватность.....	63
4 Моделирование и оптимизация	66
4. 1 Реакторный блок	66
4. 2 Узел фракционирования.....	68
5. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение.....	72
5. 1 Предпроектный анализ	72
5. 1. 1 Потенциальные потребители результатов исследования	72
5. 1. 2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	73
5. 1. 3 SWOT – анализ.....	74
5. 1. 4 Оценка готовности проекта к коммерциализации.....	78
5. 1. 5 Методы коммерциализации результатов научно – технического исследования.....	79
5. 2 Инициация проекта	80

5. 3. Планирование и формирование бюджета научного исследования	82
5. 3. 1 Контрольные события проекта	82
5. 3. 2 План проекта.....	82
5. 3. 3 Бюджет научного исследования (НИ)	85
5. 3. 3. 1 Расчет материальных затрат НИ	85
5. 3. 3. 2 Расчет затрат на специальное оборудование для научных работ	85
5. 3. 3. 3 Основная заработная плата	86
5. 3. 3. 4 Дополнительная заработная плата научно – производственного персонала	88
5. 3. 3. 5 Отчисления на социальные нужды	89
5. 3. 3. 6 Накладные расходы	89
5. 3. 4 Организационная структура проекта	91
5. 3. 5 Матрица ответственности	91
5. 3. 6 План управления коммуникациями проекта.....	92
5. 4 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности разработки модели реактора цеоформинга	93
6. Социальная ответственность	96
6. 1 Анализ выявленных вредных факторов производственной проектируемой среды	97
6. 1. 1 Характеристика используемых веществ.....	97
6. 1. 2 Микроклимат	99
6. 1. 3 Освещенность	100
6. 1. 4 Производственный шум	101
6. 1. 5 Производственная вибрация	101
6. 2 Анализ опасных факторов производственной среды.....	102
6. 2. 1 Механические опасности	102
6. 2. 2 Электробезопасность	103
6. 2. 3 Термические опасности.....	104
6. 2. 4 Пожаровзрывобезопасность.....	105
6. 3 Охрана окружающей среды	106

6. 4 Защита в чрезвычайных ситуациях (ЧС)	108
6. 5 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности	109
Заключение	110
Список публикаций студента.....	111
Список литературы	113
Приложение А. Literature review.....	120
Приложение Б. Расчет термодинамических параметров реакций.....	139
Приложение В. Расчеты на математической модели.....	164
Приложение Г. Основные параметры работы аппаратов узла фракционирования	182

Введение

Актуальность применения цеолитсодержащих катализаторов для обогащения бензинов

Процессы конверсии углеводородов (УВ), такие как каталитический крекинг УВ, изомеризация олефинов, алкилирование ароматических соединений и т.п., играют важную роль в нефтехимической промышленности. Из – за постоянно растущей конкуренции в этих областях промышленности, требования к качеству продуктов повышаются, и существует потребность в более экологически чистых процессах. Это является стимулом к более детальному пониманию и, как следствие, улучшению процессов [1].

Поскольку традиционно используемые гомогенные катализаторы являются чрезвычайно едкими и вредными для окружающей среды, все увеличивается спрос на экологически чистые гетерогенные катализаторы. Эффективность нефтепереработки в значительной степени основана на применении цеолитов в качестве катализаторов. Использование цеолитов в качестве катализаторов в нефтепереработке и нефтехимии было признано одним из главных достижений XX века.

Применение цеолитсодержащих катализаторов (ЦСК) может повысить выход требуемых продуктов и, таким образом, значительно снизить затраты на их производство. Кроме того, цеолиты имеют преимущества, по сравнению с ранее используемыми катализаторами на основе оксида алюминия, а именно наличие большей термической и механической стабильности, а также более высокой селективности.

ЦСК являются источником значительного улучшения выхода бензина и повышения октанового числа (ОЧ), а также производства более чистых топлив и смазочных материалов с улучшенными эксплуатационными свойствами [2]. Также этот катализатор характеризуется повышенной стабильностью каталитического действия, которая позволяет проводить процесс с использованием технологии с неподвижным слоем [3].

Следующие преимущества делают процессы переработки на цеолитах эффективными и привлекательными для реализации:

- Низкие эксплуатационные расходы и капитальные вложения;
- Простота технологии;
- Меньшая взрыво – и пожароопасность из – за отсутствия водорода;
- Низкая чувствительность катализатора к качеству сырья.

Таким образом, все вышеупомянутые преимущества ЦСК, позволяют разрабатывать новые высокоэффективные процессы, вытесняя тем самым дорогие платиносодержащие катализаторы и технологии с применением водорода.

Процесс цеоформинга – промышленно освоенная технология производства высокооктановых бензинов на цеолитных катализаторах, разработана научно – инженерным центром “Цеосит” Объединенного института катализа им. Г. К. Борескова.

Впервые реализация процесса с применением безводородной технологии была проведена в 1982 – 1990 годах с использованием пилотного оборудования. Процесс был внедрен в промышленность, как в России, так и за рубежом.

В августе 1992 года, первым опытным заводом, который применил технологию процесса Цеоформинг, был газоперерабатывающий завод в Нижневартовске с производственной мощностью 5 тыс. тонн сырья в год. ОЧ для бензиновой фракции было достигнуто на уровне 80 – 82 (ММ), а выход составил 82 – 85%. Период межрегенерационного пробега катализатора варьировался в пределах 220 – 300 ч.

В феврале 1997 года за рубежом другой нефтеперерабатывающий завод, а именно Глимар в Польше, начал производить неэтилированный бензин типа Евросупер – 95 с ОЧ 85 (ММ) или 95 (ИМ), используя в качестве сырья прямогонный бензин. Производственная мощность этого завода составляла 40 тыс. тонн сырья в год. Выход целевых продуктов: бензина Евросупер – 95 на

уровне 62 – 70%, а сжиженного природного газа 22 – 30%. Период межрегенерационного пробега катализатора в пределах 250 – 350 ч.

Из представленных данных развития и применения процесса Цеоформинга на малотоннажных установках в мировой практике следует, что для этого процесса характерно повышенное газообразование и, соответственно, низкий выход бензиновой фракции, что и послужило причиной ограниченного применения данной технологии. Кроме того, процесс считается неэффективным для крупнотоннажного производства из-за необходимости частых остановок для регенерации/замены катализатора.

Таким образом, сегодня, благодаря развитию науки и техники, предоставляется возможность для совершенствования процесса Цеоформинга путем вовлечения в производство автомобильных бензинов нестандартного углеводородного сырья, например, газового конденсата, конденсатов попутного газа и тп., изменения технологических режимов процесса, а также модернизации или оптимизации аппаратного оборудования на математической модели с целью повышения выхода и качества бензиновой фракции.

Цель работы

Основной целью магистерской диссертации являлось моделирование и оптимизация реакторного блока и узла фракционирования для процесса облагораживания УВ на ЦСК, расчет оптимальных конструктивных размеров реактора. Математическая модель помогает сократить количество стадий масштабного перехода, выбрать оптимальные режимы эксплуатации для производства автомобильного бензина, соответствующего требованиям ГОСТ 51866 – 2002, за одну стадию и без компаундирования сырья.

Таким образом, **объектом исследования** являлся процесс облагораживания бензиновых фракций, а **предметами исследования** были стадии высокотемпературной конверсии УВ на ЦСК и выделения бензина, соответствующего по своим качественным характеристикам государственному стандарту.

Научная новизна

1. Предложена схема превращений УВ широкой фракции на ЦСК, адекватно описывающая экспериментальные данные.
2. Исследована термодинамика целевых и побочных реакций УВ C_6 на ЦСК.
3. Решена обратная кинетическая задача и определен набор кинетических параметров реакций превращения C_6 на ЦСК.
4. В среде HYSYS Aspen Tech разработаны математические модели реакторного блока и блока выделения товарных продуктов.
5. Предложен критерий оптимизации, позволяющий определить оптимальные конструктивные и режимные параметры проведения процесса.

Практическая значимость результатов ВКР

Результаты данной работы могут быть использованы для проектирования новых и оптимизации действующих установок облагораживания УВ на цеолитах, т.к. получение продуктов с высокой стоимостью и с меньшими капитальными и эксплуатационными затратами является одной из важных задач каждой конкурентно способной компании.

Реализация и апробация работы

Результаты работы представлены и обсуждены на VI Международной студенческой электронной научной конференции “Студенческий научный форум 2014”, на XVIII Международном научном симпозиуме имени академика М.А.Усова студентов и молодых ученых “Проблемы геологии и освоения недр”, на XIV Всероссийской научно – практической конференции “Язык и мировая культура: взгляд молодых исследователей”, XV Международной научно – практической конференции студентов и молодых ученых имени Л.П. Кулёва “Химия и химическая технология в XXI веке”, XVI международной научно – практической конференции студентов и молодых ученых "Химия и химическая технология в XXI веке" посвященная 115 – летию со дня рождения профессора Л.П.Кулева, XX Международном научном симпозиуме имени академика М.А.Усова студентов и молодых ученых “Проблемы геологии и

освоения недр”, XVII международной научно – практической конференции студентов и молодых ученых "Химия и химическая технология в XXI веке" посвященная 115 – летию со дня рождения профессора Л.П.Кулева.

1 Литературный обзор

Данный раздел выполнен на иностранном языке и представлен в Приложении А.

1. 1 Аналитический обзор схем превращения и кинетических параметров реакций УВ на ЦСК

Механизм и кинетика превращений УВ на ЦСК описаны в многочисленных работах. По мнению большинства авторов [4 – 14] на цеолитах протекают следующие реакции: изомеризации, крекинг, алкилирование, дегидроциклизация, ароматизация, конденсации и т.д. Так, например, автор [4] показывает химические превращения насыщенных ациклических и циклических УВ на бифункциональном катализаторе (платина на цеолите) в ароматические соединения путем дегидрирования без уменьшения количества атомов углерода в продуктах по отношению к субстрату.

Рисунок 1 представляет основные превращения, которые происходят в процессе цеоформинга. Они включают циклизацию ациклических соединений, изомеризацию циклических соединений в циклогексан, дегидрирование и ароматизацию.



Рисунок 1 – Элементарные реакции, происходящие одновременно при цеоформинге нефти [4]

Авторами [5, 6] показано, что в настоящее время промышленное производство этилбензола базируется на алкилировании бензола этиленом в присутствии Pt – содержащего катализатора кислотного типа ZSM – 5 (1% масс) при температуре 390 – 440°C.

Первым этапом является реакция между бензолом и этиленом, с образованием этилбензола (рисунок 2 а) далее этилбензол может дополнительно вступать в реакцию с этиленом, образуя диэтилбензол (рисунок 2 б) и триэтилбензол (рисунок 2 в). Следующие реакции известны как полиалкилирование и продукты этих реакций полиэтилбензолы. Впоследствии, трансалкилирование полиэтилбензолов может иметь место до тех пор, пока термодинамическое равновесие не будет достигнуто (рисунок 2 г, д).

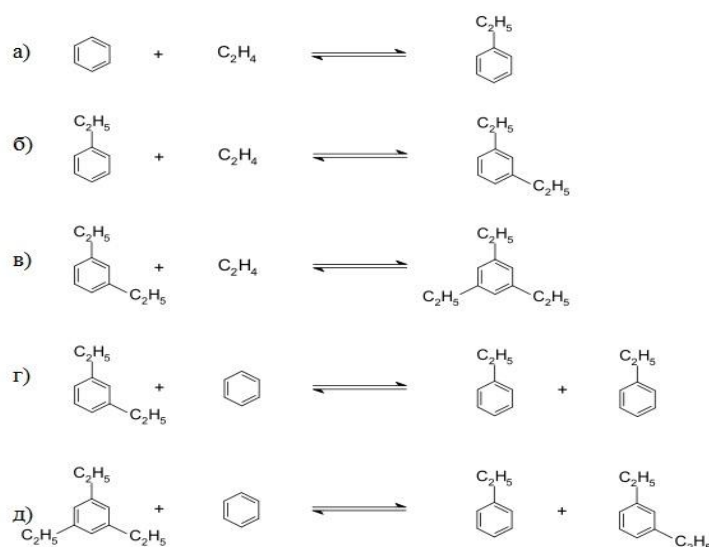


Рисунок 2 – Алкилирование бензола этиленом на ЦСК:

а) получение этилбензола; б) и в) получение ди- и полиэтилбензола;

г) и д) трансалкилирование полиэтилбензолов [5,6]

Кроме того, возможны реакции алкилирования бензола этаном с образованием толуола и метана (рисунок 3 а), а также трансалкилирование этилбензола (рисунок 3 б) в присутствии катализатора Н – ZSM – 5, содержащего платину, при температуре 450°C.

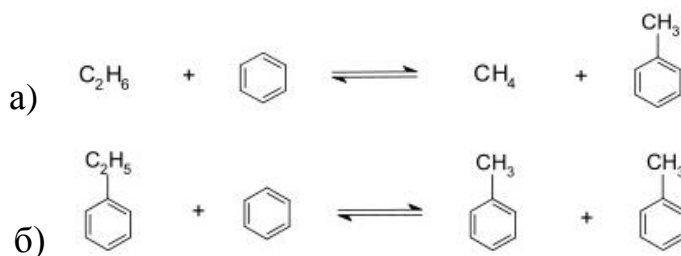


Рисунок 3– Реакции алкилирования:

а) получение толуола и метана; б) получение толуола [5, 6]

Ряд элементарных химических превращений происходят при крекинге на слоистом цеолите типа ITQ – 2, содержащем никель, гораздо лучше, чем на Ni – USY и оксиде алюминия, в температурном диапазоне 340 – 460°C. Эти классы реакций включают укорочение длины цепи парафинов в сырье, изомеризацию линейных в разветвленные алканы, замыкание кольца и гидрогенизацию / дегидрогенизацию C – C – связи.

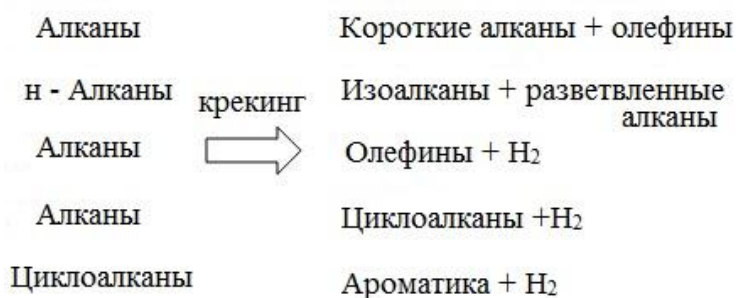


Рисунок 4 – Элементарные превращения, происходящие одновременно при крекинге [4]

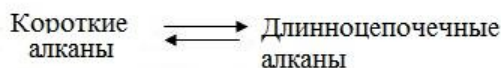
Многие исследователи [7 – 9] предполагают, что превращение легких алканов в ароматические УВ на катализаторе ZSM – 5 проходит через три главные стадии, которые представлены на рисунке 5:

- превращение алканов в алкены;
- олигомеризация и крекинг алкенов;
- ароматизация алкенов.

1. Превращение алканов в алкены



2. Олигомеризация и крекинг алкенов



3. Ароматизация алкенов

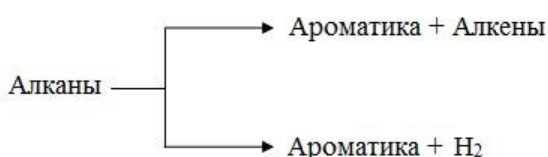


Рисунок 5 – Схема реакций ароматизации алканов на катализаторе ZSM – 5 [9]

Авторы [10 – 11] предложили схему ароматизации парафиновых УВ на катализаторе ZSM – 5, представленную на рисунке 6.



Рисунок 6 – Ароматизация парафинов на цеолите ZSM – 5 [10 – 11]

Механизм превращения прямогонных бензиновых фракций в высокооктановые бензиновые компоненты с использованием ЦСК, включают ряд последовательных и параллельных химических реакций кислотно – основного типа с образованием промежуточных карбониевых катионов. В общем, превращение УВ на цеолитах включает в себя следующие основные этапы [12]:

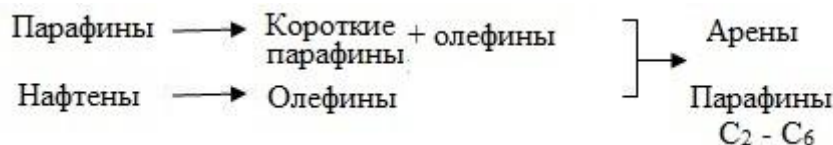


Рисунок 7 – Превращение УВ на цеолитах [12]

На первой стадии, расщепление связи С – С УВ происходит с образованием промежуточных олефиновых фрагментов. На второй стадии олефины превращаются в парафиновые и ароматические УВ из – за процессов миграции и перегруппировки водорода. Наряду с основными процессами, протекают алкилирование изопарафинов и ароматических промежуточными олефинами и изомеризации парафинов и нафтенy [13 – 14].

Очевидно, что представленные схемы несколько отличаются друг от друга. Это обусловлено, применением разных по составу и структуре катализаторов, различным составом сырья и условиями проведения процесса.

Кинетические параметры реакций также зависят от факторов, упомянутых выше. В литературных источниках приведены результаты

теоретического и экспериментального изучения кинетики превращений УВ на различных ЦСК.

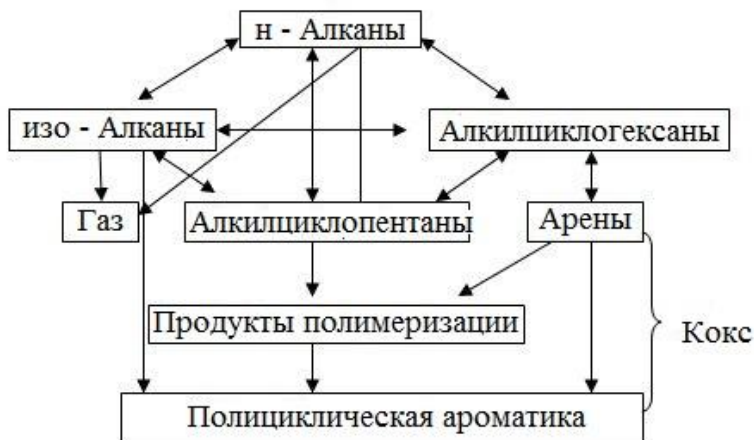


Рисунок 8 – Превращение УВ на цеолитах по [13]

В работе [15] приведены результаты экспериментального исследования кинетики окисления парафинов и нафтенов на ZSM – 5 цеолитах и ароматизации пропана на H – ZSM – 5 цеолите. Авторы отмечают, что ароматизация протекает через промежуточную стадию образования олефина, причем конверсия пропана и образование ароматических соединений идут на различных центрах поверхности цеолита. Приведенные в работе константы скоростей свидетельствуют об относительно низкой скорости дегидрирования пропана и высоких скоростях крекинга и ароматизации.

Реакции 2 – метилпентана на бифункциональном (платина на цеолите) катализаторе изучены в работе [16]. Авторами отмечена высокая селективность реакций изомеризации и низкая дегидрирования, крекинга и образования метилциклопентана в интервале температур 160 – 200°C. Наблюдаемая энергия активации для реакций изомеризации в зависимости от парциальных давлений водорода и 2 – метилпентана составила 14 – 25 ккал/моль. Наличие платины (2,9 %масс) и высокое содержание водорода в реакционной смеси не позволяют экстраполировать полученные значения кинетических параметров на реакции УВ, протекающие на ЦСК.

Кинетические параметры метилирования этилена и пропилена на протонных формах цеолитов приведены в работе [17], автор которой изучал реакции, протекающие в процессе конверсии метанола в УВ.

В статье [18] указано, что скорость крекинга алканов в основном регулируется с помощью адсорбции алканов. Для легких n – алканов показано, что уменьшение кажущейся энергии активации протеолитического крекинга при увеличении длины алкановой цепи компенсировалось увеличением теплоты адсорбции, что, в конечном счете, приводит к постоянной истинной энергии активации, которая независима от длины углеродной цепи.

Недостаток экспериментальных данных по крекингу УВ на ЦСК, особенно для многокомпонентных смесей отмечается в работе [19]. Кинетика крекинга n – гексана на ZSM – 5 цеолитах при атмосферном давлении и температурах 823 – 923K в реакторе идеального вытеснения изучена в работе [20]. Лимитирующей стадией процесса, по мнению авторов, является диффузия реагентов/продуктов в микропорах катализатора. Энергии активации реакций крекинга лежат в интервале 123 – 128 кДж/моль, коэффициент эффективной диффузии n – гексана составил $130 \cdot 10^{-11} \text{ м}^2 \text{ с}^{-1}$. В работе не приведены данные по кинетике других типов реакций гексана на цеолите, кроме того, температуры процесса существенно выше температур, при которых проводят облагораживание бензиновых фракций. Константы скорости и энергии активации для некоторых типов реакций приведены в [21]. Значения кинетических параметров, которые получены в этой работе, слабо зависят от вариаций состава сырья в пределах промышленных условий. Теплоты адсорбции УВ на ЦСК представлены в [22].

В работе [19] выполнены квантово – химические расчеты энергии активации разрыва C – C связи для C_2 – C_4 УВ на ЦСК и приведено сравнение с экспериментальными данными. Показана приемлемая для моделирования кинетики точность расчетов, однако, рост углеродной цепи реагирующих молекул и одновременное протекание других типов реакций способны существенно затруднить расчеты и снизить их точность.

В целом ощущается недостаток экспериментальных и расчетных данных по константам скоростей и энергиям активации реакций УВ на ЦСК. Практически отсутствуют данные по расчетам термодинамических характеристик и их температурных зависимостей, а также отсутствует схема превращений УВ широкой бензиновой фракции на цеолитах, которая позволила бы предсказать состав конечных продуктов превращения, и, следовательно, выход и ОЧ.

1. 2 Технология процесса цеоформинга

В процессе Цеоформинга на ЦСК в высокооктановые бензины перерабатываются прямогонные бензиновые фракции с температурой конца кипения до 200°C. Цеоформинг основан на применении катализаторов (типа ИК – 30), которые приготовлены на основе синтетических высококремнеземных цеолитов, обладающих кислотно – основным действием [23].

При превращении УВ фракций с ужесточением режима переработки, например при повышении температуры реакции, вследствие повышения газообразования, выход бензиновых фракций снижается. Однако при этом состав получаемых бензинов кардинально меняется: снижается содержание н – парафинов и нафтенев и возрастает доля высокооктановых компонентов – изопарафинов и ароматических УВ, в результате чего происходит повышение ОЧ УВ фракций от 40 – 60 ММ до 85 – 88 [24].

Технологическая схема установки цеоформинга [25] представлена на рисунке 9. На установке сырье 1 отбирают насосом из сырьевой емкости и под давлением 1,0 – 1,2 МПа подают через теплообменник в реакторный блок (РБ) РБ – 2 первоначально в трубное пространство испарителя – перегревателя 2/1, где испаряют и перегревают до температуры реакции (360 – 460°C), а затем в трубное пространство реактора 1/1, загруженное катализатором цеоформинга. В трубном пространстве реактора 1/1 на ЦСК ИК – 30 – 1 при температуре

реакции 360 – 460°С, давлении 1,0 МПа и весовой скорости подачи сырья 2 ч⁻¹ происходит превращение низкооктановых компонентов сырья в высокооктановые и в газообразные УВ.

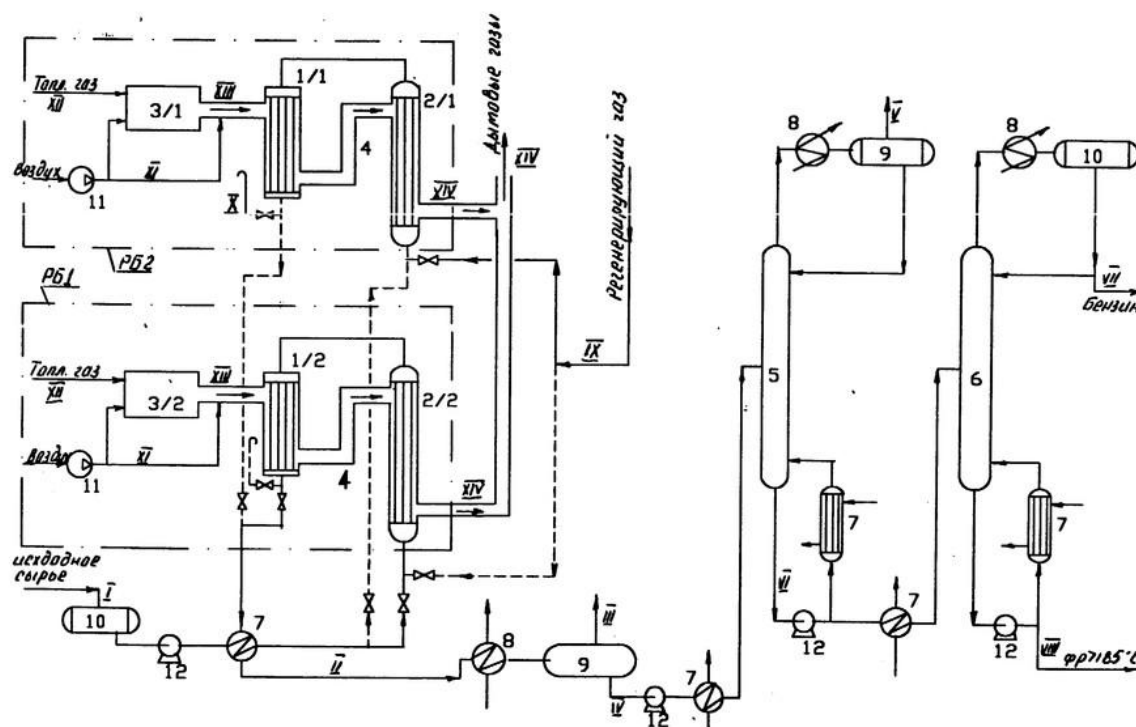


Рисунок 9 – Схема установки цеоформинга [25]:

*1 – кожухотрубчатый реактор; 2 – кожухотрубчатый теплообменный аппарат
испаритель – перегреватель; 3 – теплогенератор; 4 – газоход;
5,6 – ректификационные колонны; 7 – теплообменники и подогреватели;
8 – холодильники и конденсаторы; 9 – сепараторы; 10 – емкости; 11 – воздуходувки;
12 – насосы; РБ – 1, РБ – 2 – реакторные блоки; I – исходное сырье прямогонная
бензиновая фракция; II – продукты реакции; III, V – УВ газы; IV – нестабильный
катализат; VI – стабильный катализат; VII – высокооктановый бензин;
VIII – остаточная фракция катализата; IX – регенерирующий газ; X – газы
регенерации; XI – воздух; XII – топливный газ; XIII – газовый теплоноситель;
XIV – отработанный теплоноситель*

Для компенсации потери активности катализатора, вызванной его закоксовыванием, и поддержания состава и качества продуктов на одном постоянном уровне процесс цеоформинга осуществляют с постепенным, в

течение 150 ч, подъемом температуры реакции: начальная температура реакции 360°C, конечная 460°C.

После потери каталитической активности катализатора в реакторе 1/1 вследствие его закоксовывания (после 150 ч работы) и достижения конечной температуры реакции, производят переключение подачи сырья с РБ – 2 на РБ – 1, в котором осуществляют цеоформинг сырья, а в РБ – 2 осуществляют стадию регенерации катализатора. После закоксовывания катализатора в реакторе 1/2 производят переключение подачи сырья (с РБ – 1 на РБ – 2 и т. д.).

После реактора продукты реакции II охлаждают и конденсируют в соответствующей теплообменной аппаратуре и направляют в емкость – сепаратор для отделения УВ газов III от жидкого нестабильного катализата IV. Нестабильный катализат IV из емкости – сепаратора отбирают насосом и направляют через теплообменник, где нагревают до температуры 100°C, в ректификационную колонну – стабилизатор 5, где под давлением 0,8 МПа происходит выделение растворенных газов из бензиновой фракции.

Верхом стабилизационной колонны при температуре 70°C отбирают легкую фракцию, которую охлаждают и частично конденсируют в конденсаторе и подают в емкость – сепаратор для выделения УВ газов V; жидкий дистиллят из емкости – сепаратора возвращают в колонну 5 в виде холодного орошения. Низом стабилизационной колонны 5 при температуре 120°C отбирают стабильный катализат VI, часть которого подогревают в теплообменнике до температуры 150°C и возвращают в колонну 5 в качестве “горячей струи”; а балансовую часть подают через теплообменник, где догревают до 200°C, и в ректификационную колонну 6, где под давлением 0,2 МПа происходит разделение стабильного катализата с выделением бензиновой фракции (фракция 35 – 195°C) и остаточной фракции (фракция > 185°C).

С верха ректификационной колонны 6 при температуре 140°C отбирают пары бензина, которые охлаждают и конденсируют в конденсаторе и направляют в рефлюксную емкость, откуда часть бензина подают в колонну 6 в качестве холодного орошения, а балансовую часть отводят с установки в

качестве целевого продукта неэтилированного высокооктанового бензина VII. Низом колонны 6 при температуре 220°C отбирают остаточную фракцию катализата, которую частично направляют через подогреватель, где догревают до температуры 240°C и направляют в колонну в качестве “горячей струи”, а балансовую часть подают в теплообменник для охлаждения, а затем отводят с установки в качестве побочного продукта VIII.

Выделяемые в сепараторах углеводородные газы III и V или отводят с установки в качестве продуктов, или используют на ней полностью или частично в качестве топливного газа для энергообеспечения установки.

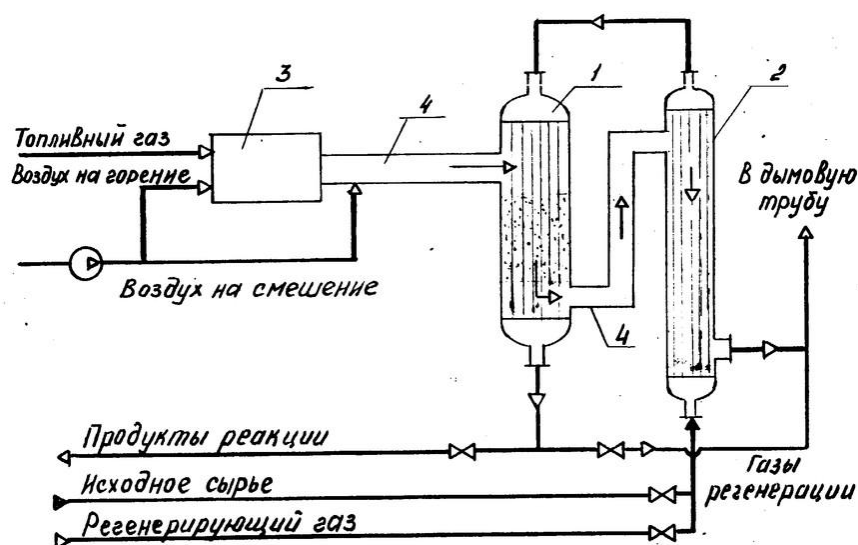


Рисунок 10 – Схема реакторного блока [25]:

1 – кожухотрубчатый реактор; 2 – кожухотрубчатый теплообменный аппарат испаритель–перегреватель; 3 – теплогенератор; 4 – газоход

Реакторный блок изображен на рисунке 10, представляет собой совокупность технологических аппаратов 1 – 3, объединенных для подачи в них газового теплоносителя газоходом 4 и которые последовательно расположены по ходу движения газового теплоносителя в следующем порядке: теплогенератор 3, реактор кожухотрубчатого типа 1 и кожухотрубчатый теплообменный аппарат 2.

При работе РБ – 1 в режиме цеоформинга получения бензина, РБ – 2 работает в режиме регенерации ранее закоксованного катализатора,

закключающегося в регулируемом выжиге коксовых отложений регенерирующим газом с определенным содержанием кислорода.

Регенерирующий газ IX подают в РБ – 2, первоначально в трубное пространство испарителя – перегревателя 2/2, где нагревают до температуры 380°C, а затем в трубное пространство реактора 1/2, где при температуре 500 – 540°C происходит процесс регенерации катализатора. После реактора отработанные газы регенерации X сбрасывают на “свечу” или в дымовую трубу.

Поддержание температурных режимов работы катализатора в реакторах 1/1, 1/2 и нагрев подаваемых в трубные пространства испарителей – перегревателей 2/1, 2/2 материальных потоков (сырье, регенерирующий газ) в каждом реакторном блоке обеспечивают за счет подачи в них по газоходам 4 газового теплоносителя XIII, который получают путем смешения в определенном соотношении в смесительных камерах теплогенераторов 3/1, 3/2 высокотемпературных дымовых газов, образующихся в теплогенераторах при сжигании топливного углеводородного газа XII и воздуха XI, подаваемого воздуходувками 11.

Рабочий газовый теплоноситель XIII из теплогенераторов 3/1, 3/2 по газоходам 4 поступает первоначально в межтрубные пространства реакторов 1/1, 1/2, а затем по газоходам 4 в межтрубные пространства испарителей – перегревателей 2/1, 2/2, после которых отработанный теплоноситель XIV сбрасывают на дымовую трубу.

На стадии цеоформинга, стадии получения бензина, поддержание температурного режима катализатора в реакторе путем подвода дополнительного количества тепла к катализатору (для компенсации падения температуры процесса вследствие протекания химических реакций с эндотермическим тепловым эффектом) обеспечивают подачей в межтрубное пространство реактора газового теплоносителя с температурой 500 – 600°C.

На стадии регенерации катализатора поддержание температурного режима катализатора путем отвода избыточного количества тепла (для

предотвращения роста температуры реакции вследствие химического выделения тепла, вызванного экзотермическим тепловым эффектом реакции) обеспечивают подачей в межтрубное пространство реактора газового теплоносителя с температурой 400 – 500°C.

В результате переработки прямогонной бензиновой фракции с ОЧ 57 ММ на описанной установке указанным способом из исходного сырья получают высокооктановую бензиновую фракцию (35 – 195°C) 60,7 %масс; остаточную фракцию > 180°C 2,8%масс; углеводородные газы 36,5%масс. Бензиновая фракция имеет ОЧ 85,4 ММ и 93,8 ИМ и содержит 8,1%масс н – парафинов, 41,3%масс изопарафинов и нафтен, 50,6%масс ароматических УВ C₆ – C₁₀ (в т.ч. C₆ – 3,5%; C₇ – 14,6%; C₈ – 21,6%; C₉ – 10,2%; C₁₀ – 0,7%); суммарный выход ароматических УВ 30,7 %масс.

1. 3 Конструктивные особенности реакторов для облагораживания УВ

Основной аппарат, который определяет эффективность каталитического процесса и глубину превращения сырья, это реактор. Каталитические реакторы с неподвижным слоем являются наиболее важным типом реактора для крупномасштабного синтеза основных химических веществ и промежуточных продуктов.

Все реакторы для каталитических процессов должны:

1. обеспечивать необходимую производительность по сырью;
2. иметь необходимый реакционный объем;
3. создать требуемую поверхность контакта взаимодействующих фаз;
4. поддерживать необходимый теплообмен в процессе;
5. поддерживать требуемую активность катализатора.

С точки зрения гидромеханических процессов, конструкция реактора должна иметь минимальное гидравлическое сопротивление и обеспечивать равномерное распределения газообразной сырьевой смеси по всему объему реакционного аппарата. Уменьшение сопротивления реакционному потоку

позволяет уменьшить рабочее давление в реакторе, что, как следствие, приводит к снижению металлоемкости всего аппарата. Неоднородность распределения сырьевого потока влияет на производительность реактора, что также приводит к неравномерному отложению кокса на катализаторе.

Для промышленных реакторов принята общеизвестная классификация. Реактора классифицируют по:

1) способу организации процесса:

- периодические реакторы (каждая отдельная стадия протекает последовательно и в разное время);

- реакторы непрерывного действия (все стадии протекают параллельно);

2) перерабатываемой среде:

- гомогенные (газофазные, жидкофазные, твердофазные);

- гетерогенные (каталитические процессы);

3) тепловому режиму:

- адиабатические (отсутствует теплообмен с окружающей средой. Все тепло, выделяемое или поглощаемое в результате химической реакции, идет на внутренний теплообмен, т.е. на нагрев или охлаждение реакционной смеси);

- изотермические (температура постоянна за счет теплообмена с окружающей средой);

- политропические (тепловой эффект реакции частично компенсируется за счет теплообмена с окружающей средой, частично вызывает изменение температуры в реакционной смеси);

4) гидродинамической обстановке в реакторе:

- реакторы идеального смешения (РИС) – емкостные аппараты с механической мешалкой или циркуляционным насосом;

- реакторы идеального вытеснения (РИВ) – трубчатый реактор, в котором перемешивание имеет местный характер и вызывается неравномерностью распределения скорости потока, пульсацией потока и завихрением;

5) по направлению движения потоков:

- с аксиальным движением (вдоль оси сверху вниз или снизу вверх);
- с радиальным движением (по радиусу от периферии к центральной трубе).

Наиболее распространенными формами реактора являются цилиндрические и сферические. Рассмотрим цилиндрические реакторы со стационарным слоем катализатора.

Согласно [26, 27], реактор представляет собой цилиндрический аппарат, изготовленный из стали. В верхней части имеется штуцер для ввода газа – сырьевой смеси. Применяют реакторы как с аксиальным (осевым) вводом газ – сырьевой смеси, так и с радиальным вводом. В первом случае газ – сырьевая смесь проходит через катализатор сверху, вывод продуктов осуществляется также сверху (рисунок 11). Входной штуцер снабжен устройством для равномерного распределения потока по всему сечению аппарата. Во втором случае [26], от сырьевого штуцера опускается вниз центральная перфорированная труба, конец которой заглушен. Газ и подаваемый поток сырья проходит через катализатор от стенки аппарата к центру по радиусу, как показано на рисунке 12.

Металлическая стенка реактора защищена футеровкой. Более того, внутри реактора устанавливается стальной перфорированный стакан, между стенкой которого и стенкой аппарата имеется газовый слой. Катализатор размещается в стальном стакане реактора сплошным слоем.

Над или под слоем катализатора (в зависимости от направления выхода продуктов реакции) располагаются фарфоровые шары для предотвращения уноса катализатора. Нижний слой катализатора лежит на решетке, дополнительно покрытой металлической сеткой. Шары, решетка и сетка защищают выводной штуцер реактора от попадания на него катализатора вместе с продуктами реакции.

По тепловому режиму такие реакторы являются адиабатическими. Они применяются тогда, когда теплота реакции маленькая, или где существует только один путь протекания реакции. Реакторы с радиальным вводом имеют

значительно меньшее гидравлическое сопротивление, чем реакторы с аксиальным вводом, лучшее распределение газо – сырьевого потока по сечению аппарата, поэтому при проектировании новых и реконструкции действующих установок наиболее предпочтительной конструкцией реактора является реактор с радиальным вводом сырья.

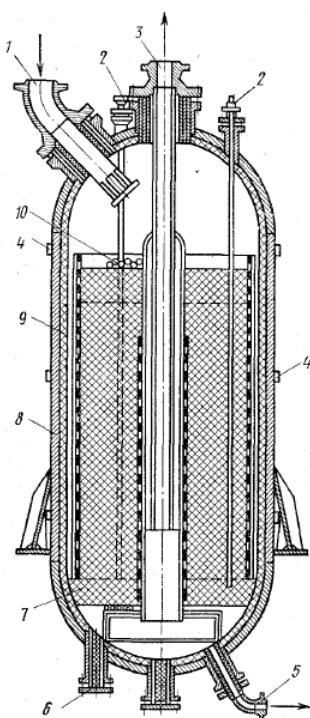


Рисунок 11 – Реактор с аксиальным движением газо – сырьевой смеси [27]:

1 – штуцер для входа сырья;
2 – зональная термопара; 3 – штуцер для выхода продуктов; 4 – наружная термопара; 5 – штуцер для вывода продуктов при эжектировании системы во время регенерации катализатора; 6 – штуцер для выгрузки катализатора; 7 – шамот; 8 – корпус реактора; 9 – футеровка; 10 – фарфоровые шары

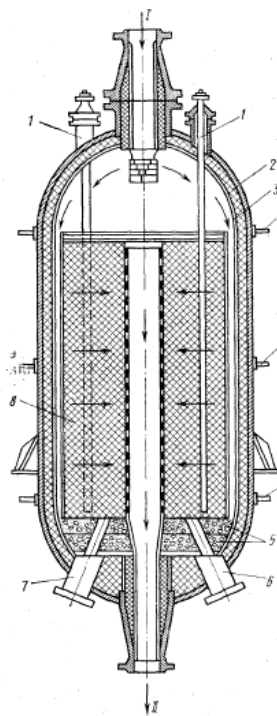


Рисунок 12 – Реактор с радиальным вводом газо – сырьевой смеси [27]:

1 – многозональная термопара;
2 – корпус реактора; 3 – футеровка;
4 – поверхностная термопара;
5 – фарфоровые шары; 6 – штуцер для вывода продуктов при эжектировании системы во время регенерации катализатора; 7 – штуцер для выгрузки катализатора; 8 – катализатор; I – газо – сырьевая смесь; II – продукты реакции

Реакции с большой теплотой реакции, а также реакции, которые чрезвычайно чувствительны к температуре проводят в реакторах, в которых

происходит косвенный теплообмен с помощью циркулирующего теплоносителя, встроенного в неподвижном слое. В большинстве случаев задача цикла теплопередачи сводится к поддержанию температуры в неподвижном слое в пределах определенного диапазона.

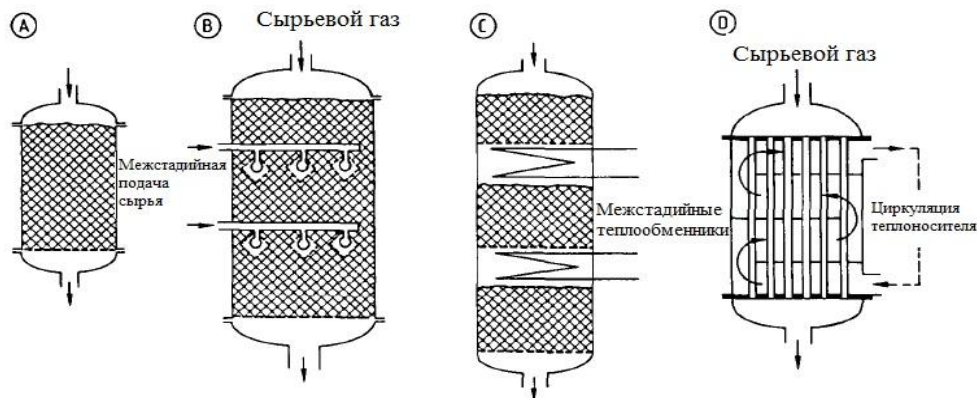


Рисунок 13 – Развитие реактора с неподвижным слоем катализатора [29]:

- А) Адиабатический реактор с неподвижным слоем катализатора;
 В) Адиабатический реактор с межстадийной подачей газа; С) Реактор многослойный адиабатический с межкаскадным теплообменом с неподвижным слоем катализатора; D) Реактор трубчатый

По [29], развитие началось с адиабатического реактора (рисунок 13 А), который за счет адиабатического изменения температуры может показать ограниченную глубину конверсии. Более высокие степени конверсии были достигнуты притом же уровне температуры, когда были введены несколько адиабатических стадий, с промежуточным нагревом или охлаждением после каждого этапа. Простейшая форма предполагает введение горячего или холодного газа между ступенями (рисунок 13 В).

Следующим шагом в развитии реакторов, была замена охлаждения межкаскадными теплообменниками, с помощью которых требуется подвод или отвод реакционного тепла (рисунок 13 С).

Многотрубчатый реактор с неподвижным слоем катализатора представлен на рисунке 13 D. При этом катализатор находится в отдельных трубах пучка труб. Теплоноситель циркулирует вокруг пучка труб, а через внешний теплообменник теплота для реакции подается или снимается.

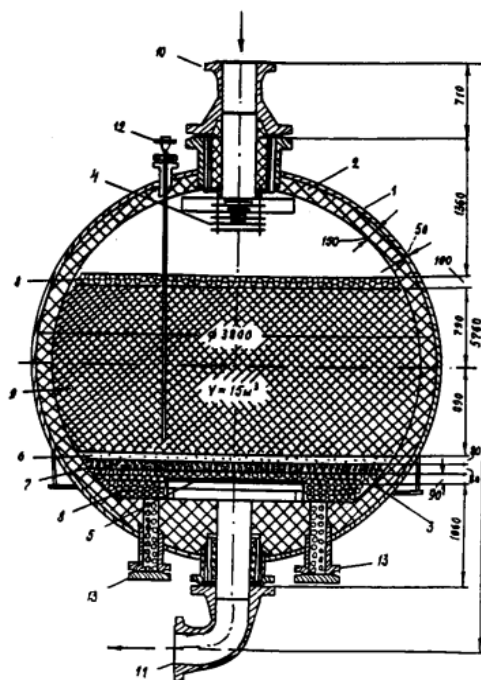


Рисунок 14 – Сферический реактор с аксиальным направлением потока [28]:

1 – корпус; 2 – футеровка; 3 – опорное кольцо; 4 – распределитель; 5 – опорная решетка с сеткой для катализатора; 6, 7, 8 – фарфоровые шары разного диаметра; 9 – катализатор; 10 – вход продукта; 11 – выход продукта; 12 – штуцер для многозонной термопары; 13 – люк для выгрузки катализатора

Рассмотрим реактор сферической формы. Такая форма реактора применяется на некоторых установках за рубежом. Сырье подается в реактор через штуцер 10 и выводится снизу аппарата через штуцер 11. Распределитель 4 служит для равномерного распределения газо – сырьевой смеси по сечению аппарата. Сверху катализатора засыпаются фарфоровые шары 8. Для уменьшения уноса катализатора внизу реактора на опорной решетке с сеткой также уложены фарфоровые шары разного диаметра в три ряда.

Достоинствами таких аппаратов является достаточно равномерное распределение сырьевого потока, небольшое гидравлическое сопротивление, что сокращает толщину стенок реактора и металлоемкость в целом. Однако, есть и существенные недостатки, такие как сложность изготовления реакторов такой формы, ограничение размеров реактора (диаметр ограничивается габаритами подвижного железнодорожного состава) на отечественных установках пока своего применения не нашли.

2. Объект и методы исследования

В рамках магистерской диссертации ООО “Анжерская нефтегазовая компания” предоставила в качестве исходных концентраций экспериментальные данные группового состава прямогонных бензиновых фракций при различных температурах проведения процесса для расчета реактора конверсии УВ на цеолитах и оптимизации процесса.

Целью исследования являлся расчет основных конструктивных и технологических характеристик реакторного оборудования, а также оптимизация реактора и узла фракционирования для получения бензина, соответствующего требованиям государственного стандарта.

Эта цель была успешно решена с использованием метода математического моделирования, который позволяет изучить свойства объектов на математических моделях, осуществлять компьютерное прогнозирование оптимальных схем и режимов эксплуатации промышленных установок для сокращения количества стадий масштабного перехода.

Для достижения данной цели необходимо было решить следующие задачи:

1. оценить термодинамическую вероятность протекания реакций;
2. сформировать схему превращений УВ на ЦСК;
3. подобрать кинетические параметры реакций;
4. построить модель реактора в HYSYS Aspen Tech;
5. проверить полученную модель на адекватность;
6. построить модель узла фракционирования в HYSYS Aspen Tech;
7. провести оптимизацию модели реактора и узла фракционирования с целью получения товарного бензина.

Для построения моделей реактора и узла фракционирования использовалась моделирующая система HYSYS Aspen Tech. HYSYS – продукт американской компании AspenTechnologiesInc. Программное обеспечение HYSYS Aspen Tech представляет собой пакет программ, которые

предназначены для расчета стационарных и динамических режимов работы химико – технологических схем. Программа содержит в своем составе массообменную и теплообменную аппаратуру, а также трубопроводы, реакторы и т.д. В данной программе также возможно проведение оптимизационных расчетов, разработка схем регулирования и контроля за работой систем управления, также возможно обучения операторов технологических установок, и проведение расчетов для процессов на основе данных, которые непосредственно поступают с контрольно – измерительной аппаратуры.

3 Расчетная часть

3. 1 Расчет термодинамических параметров реакций

Первым шагом являлась оценка термодинамической вероятности протекания реакций, описанных в литературных источниках.

Одной из задач термодинамического анализа является расчет константы равновесия. Расчет константы равновесия реакции K_p производили на основании зависимости последней от энергии Гиббса ΔG по формуле (1):

$$\Delta G = -RT \ln K_p \quad (1)$$

где ΔG – энергия Гиббса реакции, кДж/моль;

R – универсальная газовая постоянная, 8,314 кДж/(моль·К);

T – температура химической реакции, К;

K_p – константа равновесия реакции.

Энергию Гиббса реакции можно определить по стандартным энергиям образования индивидуальных веществ по формуле (2):

$$\Delta G_p = \sum G_{np}^0 - \sum G_{исх}^0, \quad (2)$$

где $\sum G_{np}^0$ – суммарная энергия Гиббса образования продуктов реакции;

$\sum G_{исх}^0$ – суммарная энергия Гиббса образования исходных веществ.

Был произведен расчет термодинамических характеристик для всех типов реакций УВ на цеолитсодержащих катализаторах. Расчет выполнен в интервале температур 593 – 703 К. В таблице 1 представлены значения энергии Гиббса и константы равновесия реакции при температуре 603К.

Таблица 1 – Энергия Гиббса и константы равновесия реакций

№	Реакция	ΔG_p , кДж/моль	K_p
1	2	3	4
1	Гексан \leftrightarrow 2 – метилпентан	–2,61	1,683
2	Гексан \leftrightarrow 3 – метилпентан	0,74	0,862
3	2 – метилпентан \leftrightarrow 3 – метилпентан	3,35	0,512
4	Гексан \rightarrow Циклогексан + H ₂	20,09	0,018

Продолжение таблицы 1

1	2	3	4
5	2 – метилпентан \leftrightarrow Метилциклопентан+ H ₂	13,83	0,063
6	3 – метилпентан \leftrightarrow Метилциклопентан+ H ₂	10,48	0,124
7	Циклогексан \leftrightarrow Бензол + H ₂	-18,72	41,848
8	Метилциклопентан \leftrightarrow Бензол + H ₂	-9,85	7,139
9	2 – метилпентан \rightarrow 2,3–диметилбутан	5,82	0,313
10	3 – метилпентан \rightarrow 2,2–диметилбутан	-0,99	1,218
11	2,2–диметилбутан \leftrightarrow 2,3–диметилбутан	3,45	0,502
12	Гексан \rightarrow Бутан + Этилен	8,68	0,177
13	Гексан \rightarrow Этан + Бутен	-5,22	2,834
14	Гексан \rightarrow Метан + Пентен	-15,01	19,672
15	Гексан \rightarrow Пропан + Пропен	-4,86	2,635
16	Гексан+ H ₂ \rightarrow Пропан + Пропан	-50,31	22791,5
17	2 – метилпентан \leftrightarrow 2 – метилпентен	40,36	0,00032
18	2 – метилпентен \leftrightarrow Метилциклопентан	-26,52	198,321
19	3 – метилпентан \leftrightarrow 3 – метилпентен	46,69	0,00009
20	3 – метилпентен \leftrightarrow Метилциклопентан	-36,19	1364,76
21	Гексан \leftrightarrow Гексен+ H ₂	47,25	0,00008
22	Гексен \leftrightarrow Циклогексан	-27,16	225,325
23	Бензол + Этилен \leftrightarrow Этилбензол	-28,71	306,716
24	Бензол + Этан \leftrightarrow Толуол	-5,78	3,166
25	Гептан \leftrightarrow Толуол + H ₂	-18,08	36,818

Анализируя полученные данные, можно отметить реакции, протекание которых термодинамически возможно в условиях цеоформинга, а именно это реакции № 1, 7, 8, 10, 13 – 16, 18, 20, 22 – 25. Реакции циклизации парафинов и изопарафинов № 4, 5, 6 имеют низкую вероятность протекания при данных условиях, т.к. расчетами доказано, что наиболее вероятны реакции циклизации через образование олефиновых фрагментов (реакции №18, 20, 22).

3. 2 Формирование схемы превращений

На основании термодинамических расчетов, экспериментальных и литературных данных для построения модели реактора облагораживания прямогонных бензиновых фракций была предложена модельная схема превращений (рисунок 15).

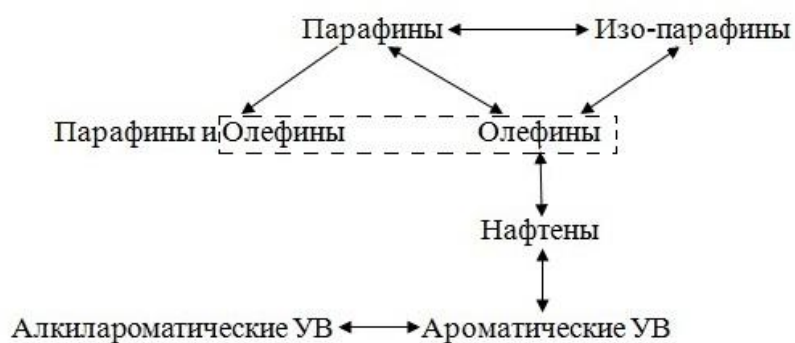


Рисунок 15 – Модельная схема превращения углеводородов на цеолитах

Парафины подвергаются изомеризации, крекингу, а также переходят в нафтенy через олефиновые УВ. Также учтены реакции ароматизации и алкилирования. Все реакции являются обратимыми, за исключением крекинга.

3. 3 Подбор кинетических параметров

Как будет упоминаться в пункте 3. 4. 1, в модели использовали тип реакции – простая реакция, приняв допущение о псевдогомогенности протекающих превращений. В рамках данного типа реакции скорости реакций описываются законом действующих масс (3), температурная зависимость энергии активации описывается уравнением Аррениуса (4), температурная зависимость константы равновесия описывается уравнением (5).

$$R = k \cdot \left(C_a - \frac{C_B}{K'} \right), \quad (3)$$

где k – константа скорости реакций;

C_a , C_B – концентрация исходного вещества и продукта реакции;

K' – константа равновесия.

$$k = A \cdot e^{-\frac{E}{RT}} \cdot T^X, \quad (4)$$

где A – предэкспоненциальный множитель;

E – энергия активации, Дж / моль;

R – универсальная газовая постоянная, Дж / (моль · К);

T – температура, К;

X – свободный множитель.

$$\ln(K') = A' + \frac{B'}{T} + C' \cdot \ln(T) + D' \cdot T, \quad (5)$$

где A' , B' , C' , D' – свободные члены уравнения.

На основе выполненных термодинамических расчетов получены зависимости логарифма константы равновесия от температуры в интервале 593 – 723К, что соответствует температурам проведения процесса (Приложение Б).

На рисунках 16 – 18 представлены графики зависимости логарифма константы равновесия от температуры для реакций ароматизации, изомеризации и перехода олефинов в нафтены.

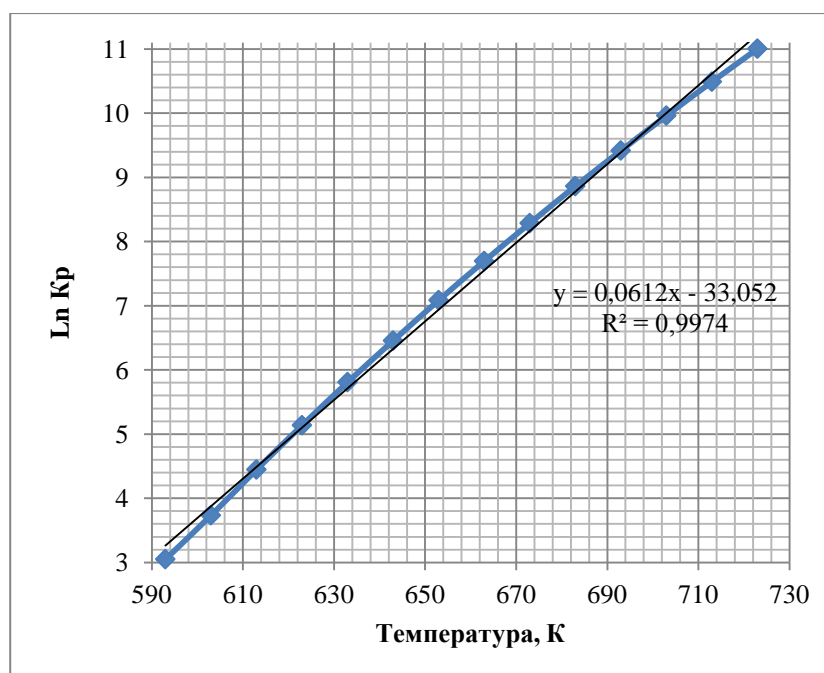


Рисунок 16 – Зависимость логарифма константы равновесия от температуры для реакции: Циклогексан \leftrightarrow Бензол + H_2

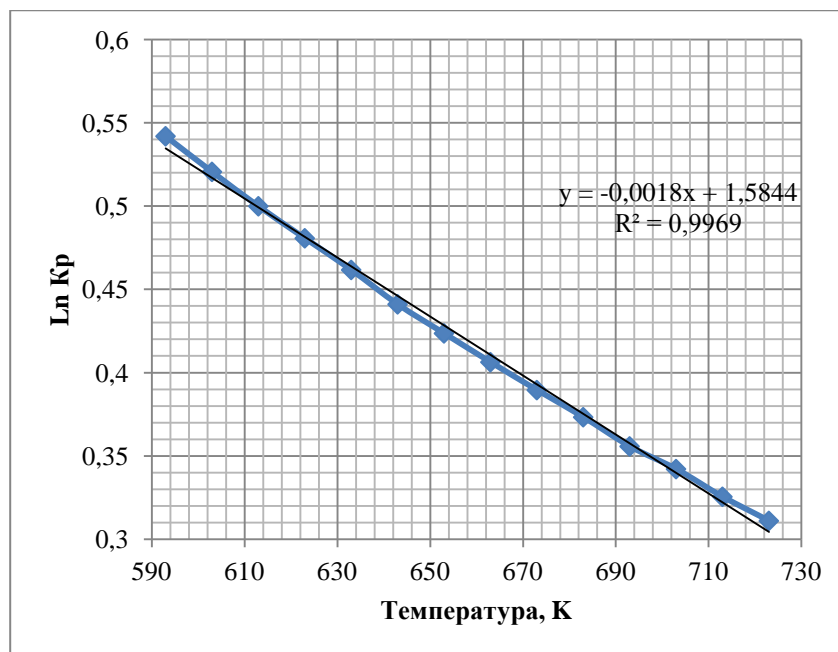


Рисунок 17 – Зависимость логарифма константы равновесия от температуры для реакции: Гексан \leftrightarrow 2-метилпентан

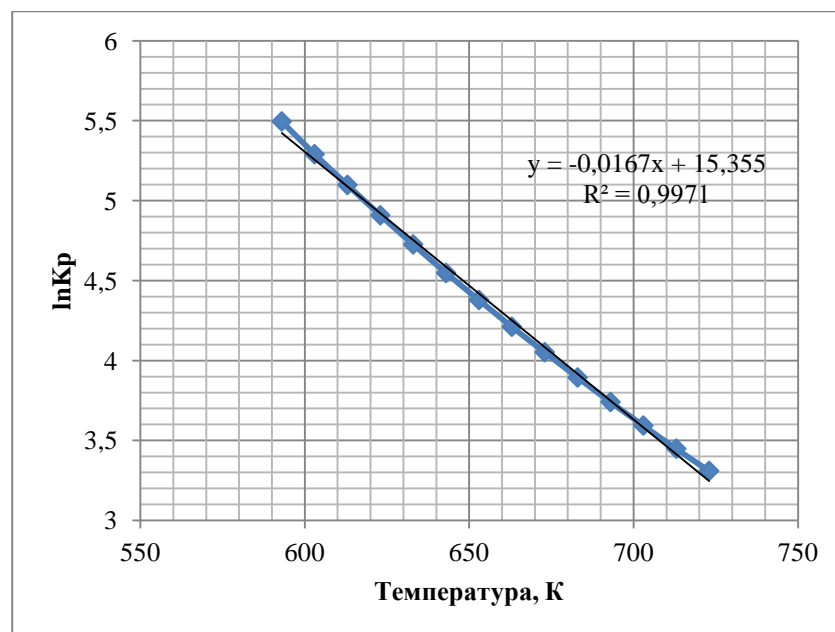


Рисунок 18 – Зависимость логарифма константы равновесия от температуры для реакции: 2 – метилпентен \leftrightarrow Метилциклопентан

Установлено, что формулу (4) можно упростить без потери точности модели до линейного уравнения (таблица 2).

Для решения обратной кинетической задачи использованы некоторые данные о константах и энергиях активации реакций, приведенные в [21],

которые затем уточнялись для адекватного описания экспериментальных данных. Результаты расчета представлены в таблицах 3 и 4.

Таблица 2 – Зависимость логарифма константы равновесия от температуры для реакций

Реакция	Уравнение	Коэффициент достоверности аппроксимации, R^2
н-Гексан \leftrightarrow 2 – метилпентан	$y = -0,001x + 1,584$	$R^2 = 0,996$
н-Гексан \leftrightarrow 3 – метилпентан	$y = -0,001x + 0,608$	$R^2 = 0,997$
2 – метилпентан \leftrightarrow 3 – метилпентан	$y = 0,000x - 0,976$	$R^2 = 0,994$
Циклогексан \leftrightarrow Бензол + $3H_2$	$y = 0,061x - 33,05$	$R^2 = 0,997$
Метилциклопентан \leftrightarrow Бензол + $3H_2$	$y = 0,057x - 32,31$	$R^2 = 0,997$
2 – метилпентан \rightarrow 2,3–диметилбутан	$y = -0,001x - 0,439$	$R^2 = 0,996$
3 – метилпентан \rightarrow 2,2–диметилбутан	$y = -0,003x + 2,398$	$R^2 = 0,996$
2,2–диметилбутан \leftrightarrow 2,3–диметилбутан	$y = 0,002x - 1,861$	$R^2 = 0,996$
н-Гексан \rightarrow Бутан + Этилен	$y = 0,025x - 17,11$	$R^2 = 0,996$
н-Гексан \rightarrow Этан + Бутен	$y = 0,022x - 12,29$	$R^2 = 0,996$
н-Гексан \rightarrow Метан + Пентен	$y = 0,019x - 8,697$	$R^2 = 0,996$
н-Гексан \rightarrow Пропан + Пропен	$y = 0,022x - 12,58$	$R^2 = 0,996$
Гексан+ $H_2 \rightarrow$ Пропан + Пропан	$y = -0,012x + 17,67$	$R^2 = 0,990$
2 – метилпентан \leftrightarrow 2 – метилпентен + H_2	$y = 0,035x - 29,29$	$R^2 = 0,997$
2 – метилпентен \leftrightarrow Метилциклопентан	$y = -0,016x + 15,35$	$R^2 = 0,997$
3 – метилпентан \leftrightarrow 3 – метилпентен + H_2	$y = 0,037x - 31,87$	$R^2 = 0,997$
3 – метилпентен \leftrightarrow Метилциклопентан	$y = -0,019x + 18,90$	$R^2 = 0,997$
н-Гексан \leftrightarrow Гексен+ H_2	$y = 0,036x - 31,24$	$R^2 = 0,997$
Гексен \leftrightarrow Циклогексан	$y = -0,023x + 19,64$	$R^2 = 0,997$
Бензол + Этилен \leftrightarrow Этилбензол	$y = -0,029x + 23,14$	$R^2 = 0,996$
Гептан \leftrightarrow Тoluол + $4H_2$	$y = 0,070x - 38,69$	$R^2 = 0,997$

Таблица 3 – Значения предэкспоненциального множителя и энергии активации

Реакция	A	E _a , кДж/моль
н-Гексан ↔ 2 – метилпентан	8	15
н-Гексан ↔ 3 – метилпентан	8	15
2 – метилпентан ↔ 3 – метилпентан	6	20
Циклогексан ↔ Бензол + 3H ₂	3	40
Метилциклопентан ↔ Бензол + 3H ₂	3	40
2 – метилпентан ↔ 2,3–диметилбутан	3	20
3 – метилпентан ↔ 2,2–диметилбутан	3	20
2,2–диметилбутан ↔ 2,3–диметилбутан	6	25
н-Гексан → Бутан + Этилен	0,002	16
н-Гексан → Этан + Бутен	0,002	16
н-Гексан → Метан + Пентен	0,002	16
н-Гексан → Пропан + Пропен	0,002	16
Гексан+ H ₂ → Пропан + Пропан	0,58	16
2 – метилпентан ↔ 2 – метилпентен + H ₂	1	50
2 – метилпентен ↔ Метилциклопентан	8	50
3 – метилпентан ↔ 3 – метилпентен + H ₂	1	50
3 – метилпентен ↔ Метилциклопентан	8	50
н-Гексан ↔ Гексен+ H ₂	6	50
Гексен ↔ Циклогексан	8	50
Бензол + Этилен ↔ Этилбензол	6	20
Гептан ↔ Толуол + 4H ₂	6	20

Таблица 4 – Значения константы скорости реакций при разных температурах

Реакция	Константа скорости		
	T=335°C	T=395°C	T=405°C
1	2	3	4
н-Гексан ↔ 2 – метилпентан	0,4	0,54	0,56
н-Гексан ↔ 3 – метилпентан	0,4	0,54	0,56
2 – метилпентан ↔ 3 – метилпентан	0,11	0,16	0,17
Циклогексан ↔ Бензол + 3H ₂	0,0011	0,0022	0,0025
Метилциклопентан ↔ Бензол + 3H ₂	0,0011	0,0022	0,0025

Продолжение таблицы 4

1	2	3	4
2 – метилпентан \leftrightarrow 2,3–диметилбутан	0,06	0,08	0,086
3 – метилпентан \leftrightarrow 2,2–диметилбутан	0,06	0,08	0,086
2,2–диметилбутан \leftrightarrow 2,3–диметилбутан	0,04	0,066	0,07
н–Гексан \rightarrow Бутан + Этилен	0,00008	0,00011	0,00012
н–Гексан \rightarrow Этан + Бутен	0,00008	0,00011	0,00012
н–Гексан \rightarrow Метан + Пентен	0,00008	0,00011	0,00012
н–Гексан \rightarrow Пропан + Пропен	0,00008	0,00011	0,00012
Гексан+ $H_2 \rightarrow$ Пропан + Пропан	0,00008	0,00011	0,00012
2 – метилпентан \leftrightarrow 2 – метилпентен + H_2	0,00005	0,00012	0,00014
2 – метилпентен \leftrightarrow Метилциклопентан	0,0004	0,00098	0,0011
3 – метилпентан \leftrightarrow 3 – метилпентен + H_2	0,00005	0,00012	0,00014
3 – метилпентен \leftrightarrow Метилциклопентан	0,0004	0,00098	0,0011
н–Гексан \leftrightarrow Гексен+ H_2	0,00005	0,00012	0,00014
Гексен \leftrightarrow Циклогексан	0,0004	0,00098	0,00014
Бензол + Этилен \leftrightarrow Этилбензол	0,11	0,16	0,17
Гептан \leftrightarrow Толуол + $4H_2$	0,11	0,16	0,17

Константа скорости реакций увеличивается с повышением температуры, в соответствии с уравнением Аррениуса (3). Зависимость константы скорости от температуры для реакции циклизации олефина показана на рисунке 19.

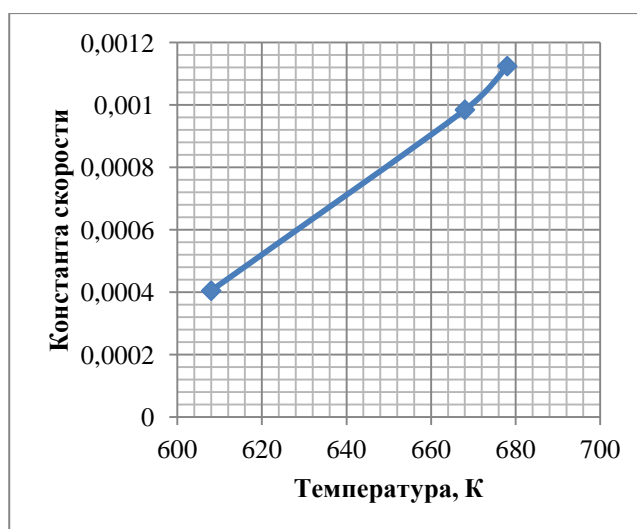


Рисунок 19 – Зависимость константы скорости от температуры для реакции 2–метилпентен \rightarrow Метилциклопентан

В качестве исходных концентраций использованы экспериментальные данные ООО “Анжерская нефтегазовая компания”, представленные в таблице 5.

Таблица 5 – Групповой состав исходной смеси

Группа УВ	Состав, % масс.
Парафины	39,33
Изопарафины	25,36
Ароматика	6,12
Нафтенy	29,18
Олефины	0,00

Для построения кинетической модели и модели реактора была использована упрощенная (модельная) смесь УВ. Используемый в расчетах состав приведен в таблице 6.

Таблица 6 – Компонентный состав исходной смеси

УВ	23– диметилбутан	3– метилпентан	2– метилпентан	22– диметилбутан	Метилциклопентан	Циклогексан
Состав, % масс.	6,34	6,34	6,34	6,34	14,59	14,59
УВ	Гексан	Водород	Бензол	Пропан	Метан	Этан
Состав, % масс.	26,91	0,00	1,74	0,97	0,00	0,10
УВ	Бутан	Этен	Пропен	Бутен	Этилбензол	Пентен
Состав, % масс.	5,08	0,00	0,00	0,00	2,81	0,00
УВ	Гептан	Толуол				
Состав, % масс.	6,27	1,57				

При данных принятых значениях провели расчет в программе HYSYS Aspen Plus. Результаты расчета для температуры 335°C приведены на рисунке 20. Результаты для температуры 395°C на рисунке 21, для температуры 405°C на рисунке 22. На основании исходных данных был рассчитан и смоделирован в программной среде Aspen HYSYS реактор, который показан на рисунке 23.

Material Stream: in			Material Stream: out		
Worksheet	Attachments	Dynamics	Worksheet	Attachments	Dynamics
Conditions	23-Mbutane	Mass Fractions	Conditions	23-Mbutane	Mass Fractions
Properties	3-Mpentane	0.0634	Properties	3-Mpentane	0.0649
Composition	2-Mpentane	0.0634	Composition	2-Mpentane	0.1370
Oil & Gas Feed	22-Mbutane	0.0634	Oil & Gas Feed	22-Mbutane	0.1312
Petroleum Assay	Myclopentan	0.1459	Petroleum Assay	Myclopentan	0.1275
K Value	Cyclohexane	0.1459	K Value	Cyclohexane	0.0388
User Variables	n-Hexane	0.2691	User Variables	n-Hexane	0.0639
Notes	Hydrogen	0.0000	Notes	Hydrogen	0.0107
Cost Parameters	Benzene	0.0174	Cost Parameters	Benzene	0.1251
Normalized Yields	Propane	0.0097	Normalized Yields	Propane	0.0877
	Methane	0.0000		Methane	0.0004
	Ethane	0.0010		Ethane	0.0017
	n-Butane	0.0508		n-Butane	0.0521
	Ethylene	0.0000		Ethylene	0.0002
	Propene	0.0000		Propene	0.0009
	1-Butene	0.0000		1-Butene	0.0013
	E-Benzene	0.0281		E-Benzene	0.0297
	1-Pentene	0.0000		1-Pentene	0.0016
	n-Heptane	0.0627		n-Heptane	0.0105
	Toluene	0.0157		Toluene	0.0637
	2M1C5=	0.0000			
	1-Hexene	0.0000			
	Total	1.00000		Total	1.00000
	Edit...	View Properties...		Edit...	View Properties...
		Basis...			Basis...
	OK			OK	

Рисунок 20 – Состав сырья и продуктов, при температуре 335°C

Material Stream: in			Material Stream: out		
Worksheet	Attachments	Dynamics	Worksheet	Attachments	Dynamics
Conditions	23-Mbutane	Mass Fractions	Conditions	23-Mbutane	Mass Fractions
Properties	3-Mpentane	0.0634	Properties	3-Mpentane	0.0662
Composition	2-Mpentane	0.0634	Composition	2-Mpentane	0.1386
Oil & Gas Feed	22-Mbutane	0.0634	Oil & Gas Feed	22-Mbutane	0.1254
Petroleum Assay	Myclopentan	0.1459	Petroleum Assay	Myclopentan	0.0943
K Value	Cyclohexane	0.1459	K Value	Cyclohexane	0.0267
User Variables	n-Hexane	0.2691	User Variables	n-Hexane	0.0667
Notes	Hydrogen	0.0000	Notes	Hydrogen	0.0145
Cost Parameters	Benzene	0.0174	Cost Parameters	Benzene	0.1687
Normalized Yields	Propane	0.0097	Normalized Yields	Propane	0.0876
	Methane	0.0000		Methane	0.0003
	Ethane	0.0010		Ethane	0.0016
	n-Butane	0.0508		n-Butane	0.0520
	Ethylene	0.0000		Ethylene	0.0002
	Propene	0.0000		Propene	0.0008
	1-Butene	0.0000		1-Butene	0.0011
	E-Benzene	0.0281		E-Benzene	0.0295
	1-Pentene	0.0000		1-Pentene	0.0014
	n-Heptane	0.0627		n-Heptane	0.0056
	Toluene	0.0157		Toluene	0.0683
	2M1C5=	0.0000		2M1C5=	0.0000
	1-Hexene	0.0000			
	Total	1.00000		Total	1.00000
	Edit...	View Properties...		Edit...	View Properties...
		Basis...			Basis...
	OK			OK	

Рисунок 21 – Состав сырья и продуктов, при температуре 395°C

Material Stream: in			Material Stream: out		
Worksheet	Mass Fractions		Worksheet	Mass Fractions	Vapour
Conditions	23-Mbutane	0.0634	Conditions	23-Mbutane	0.0505
Properties	3-Mpentane	0.0634	Properties	3-Mpentane	0.0665
Composition	2-Mpentane	0.0634	Composition	2-Mpentane	0.1389
Oil & Gas Feed	22-Mbutane	0.0634	Oil & Gas Feed	22-Mbutane	0.1245
Petroleum Assay	Myclopentan	0.1459	Petroleum Assay	Myclopentan	0.0883
K Value	Cyclohexane	0.1459	K Value	Cyclohexane	0.0247
User Variables	n-Hexane	0.2691	User Variables	n-Hexane	0.0672
Notes	Hydrogen	0.0000	Notes	Hydrogen	0.0151
Cost Parameters	Benzene	0.0174	Cost Parameters	Benzene	0.1764
Normalized Yields	Propane	0.0097	Normalized Yields	Propane	0.0874
	Methane	0.0000		Methane	0.0003
	Ethane	0.0010		Ethane	0.0016
	n-Butane	0.0508		n-Butane	0.0520
	Ethylene	0.0000		Ethylene	0.0002
	Propene	0.0000		Propene	0.0008
	1-Butene	0.0000		1-Butene	0.0011
	E-Benzene	0.0281		E-Benzene	0.0295
	1-Pentene	0.0000		1-Pentene	0.0014
	n-Heptane	0.0627		n-Heptane	0.0049
	Toluene	0.0157		Toluene	0.0688
	2M1C5=	0.0000		2M1C5=	0.0000
	1-Hexene	0.0000			
	Total	1.00000		Total	1.00000

Рисунок 22 – Состав сырья и продуктов, при температуре 405°C

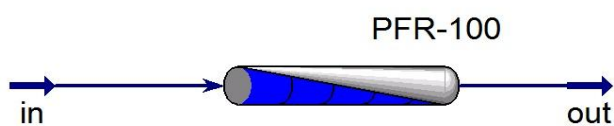


Рисунок 23 – Реактор превращений углеводородов на цеолитсодержащих катализаторах, смоделированный в среде Aspen HYSYS

3. 4 Предварительный расчет реактора облагораживания УВ на ЦСК

3. 4. 1 Материальный баланс

Задача материального баланса заключается в установлении равенства между количеством вводимого сырья в реактор и выводимых продуктов из него. Расчет материального баланса проводился в следующей последовательности:

- 1) ввод компонентов

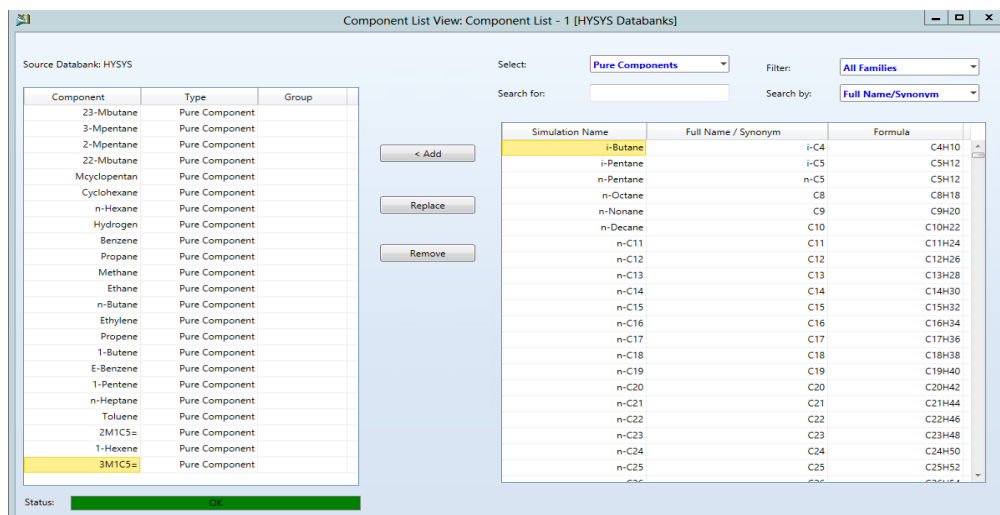


Рисунок 24 – Ввод исходных компонентов в расчетную среду HYSYS

2) выбор термодинамического пакета Peng – Robinson

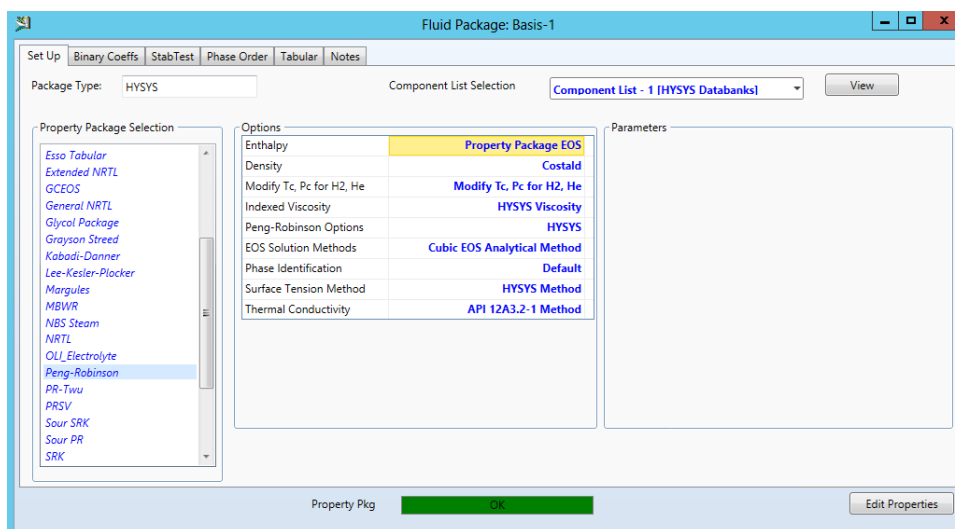


Рисунок 25 – Выбор термодинамического пакета

3) составление реакций. Программное обеспечение HYSYS Aspen Plus содержит ряд различных вариантов описания химических реакций. Так, например, в программе представлены реакции химической диссоциации, химического равновесия, конверсии, гетерогенно – каталитические реакции, кинетические и простые реакции. В модели использовали тип реакции – простая реакция, приняв допущение о псевдогомогенности протекающих превращений.

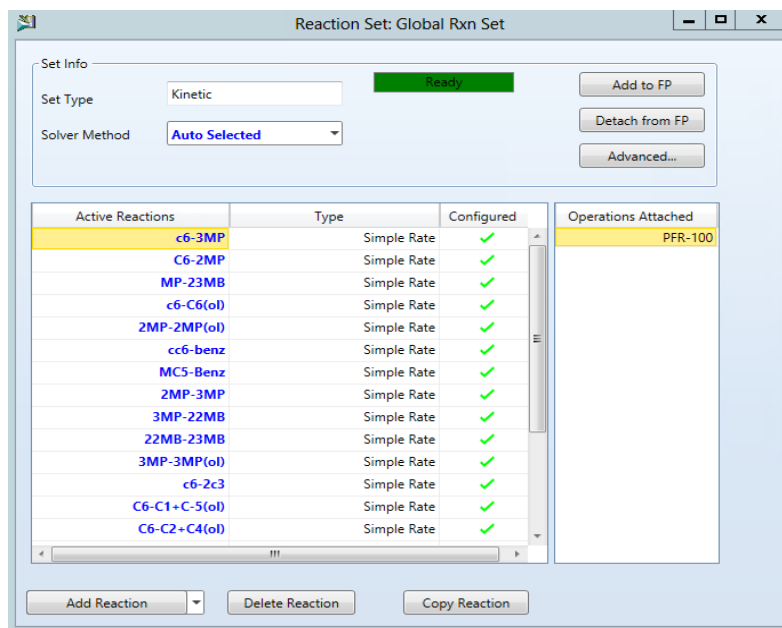


Рисунок 26 – Создание реакций

4) выбор реактора, составление схемы процесса, выполнение обвязки реактора, выбор набора реакций, которые будут протекать в этом реакторе.

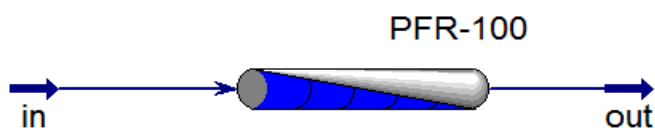


Рисунок 27 – Схема реактора в HYSYS

В модели в качестве предварительных были приняты следующие характеристики реактора:

- гидродинамический режим – идеальное вытеснение;
- температура – 335°C;
- давление – 1,5 МПа;
- расход сырья – 3500 кг/час.

Материальный баланс составлялся исходя из общего расхода смеси и содержания каждого компонента в ней (6):

$$G_i = G \cdot x_i \quad (6)$$

где G_i – массовый расход каждого компонента, кг/ч;

G – общий расход сырья, кг/ч;

x_i – содержание компонента, м.д.

В таблице 7 представлен расчет материального баланса реактора.

Таблица 7 – Материальный баланс реактора

Компоненты	Вход			Выход		
	Общий расход, кг/ч	Содержание, м.д.	Расход компонента, кг/ч	Содержание, м.д.	Расход компонента, кг/ч	Общий расход, кг/ч
23–диметилбутан	3500,00	0,0634	222,03	0,0510	178,59	3500,00
3–метилпентан		0,0634	222,03	0,0649	227,18	
2–метилпентан		0,0634	222,03	0,1370	479,63	
22–диметилбутан		0,0634	222,03	0,1312	459,15	
Метилциклопентан		0,1459	0,1459	0,1275	0,1275	
Циклогексан		0,1459	510,49	0,0388	135,97	
н–Гексан		0,2691	941,96	0,0639	223,69	
Водород		0,0000	0,00	0,0107	37,40	
Бензол		0,0174	60,84	0,1251	437,85	
Пропан		0,0097	33,92	0,0877	306,96	
Метан		0,0000	0,00	0,0004	1,27	
Этан		0,0010	3,50	0,0017	5,88	
н–Бутан		0,0508	177,97	0,0521	182,45	
Этилен		0,0000	0,00	0,0002	0,65	
Пропен		0,0000	0,00	0,0009	3,32	
Бутен–1		0,0000	0,00	0,0013	4,45	
Этилбензол		0,0281	98,25	0,0297	103,98	
Пентен–1		0,0000	0,00	0,0016	5,57	
н–Гептан		0,0627	219,58	0,0105	36,73	
Толуол		0,0157	54,90	0,0637	223,04	
2–метилпентен–1		0,0000	0,00	0,0000	0,01	
Гексен–1		0,0000	0,00	0,0000	0,00	
3–метилпентен–1		0,0000	0,00	0,0000	0,00	
Сумма		1,0000	3500,00	1,0000	3500,00	

Т.к. в левой части таблицы количество приходящего сырья равно количеству выходящих продуктов правой части таблицы, то можно считать, что материальный баланс реактора составлен, верно.

3. 4. 2 Тепловой баланс

Для расчета теплового баланса процесса сначала выбрали, в каком тепловом режиме будет работать реактор. Приняли тепловой режим – адиабатический, т.е. без теплообмена с окружающей средой. Все тепло, которое

выделилось или поглотилось в результате принятых реакций идет на нагрев либо охлаждение смеси. Тогда задача теплового баланса сводится к определению роста или падение температуры от входа к выходу реактора.

The screenshot shows a software window titled "Simple Rate Reaction: c6-3MP". It contains several panels:

- Stoichiometry and Rate Information:** A table with columns "Component", "Mole Weight", and "Stoich Coeff". It lists "n-Hexane" with a mole weight of 86.178 and a stoichiometric coefficient of -1.000, and "3-Mpentane" with a mole weight of 86.178 and a stoichiometric coefficient of 1.000. There is a button labeled "**Add Comp**".
- Basis:** A section with fields for "Basis Component" (n-Hexane), "Rxn Phase" (VapourPhase), "Min Temperature" (-273.1 C), and "Max Temperature" (3000 C). It also has dropdown menus for "Basis Units" (kmole/m3) and "Rate Units" (kmole/m3-s).
- Forward Reaction:** A table with columns "A", "E", and "B". The values are 8.0e+00, 1.5e+01, and 0.000e-01 respectively.
- Reverse Reaction:** A table with columns "A'", "B'", "C'", and "D'". The values are 6.1e-01, 0.0e-01, 0.0e-01, and -1.3e-03 respectively.
- Equation Help:** A section with mathematical formulas for reaction rate (r), equilibrium constant (k), and natural logarithm of the equilibrium constant (ln(K)).
- Balance:** A section with fields for "Balance Error" (0.00000) and "Reaction Heat (25 C)" (-4.4e+03 kJ/kgmole).

Рисунок 28 – Тепло реакции превращения н – гексана в 3 – метилпентан

В расчетной среде HYSYS тепло каждой реакции считается автоматически и выражено в кДж/кмоль. Для всех реакций выбран целевой компонент (ЦК), это, как правило, исходное вещество. В данном примере целевым компонентом является гексан.

В таблице 8 представлен расчет суммарного тепла, которое выделилось или поглотилось в ходе процесса в реакторе.

Таблица 8 – Расчет суммарного тепла

Реакция	Тепло реакции, кДж/кмоль	ЦК	Содержание ЦК, м.д.	Расход ЦК, кмоль/ч	Суммарное тепло, кДж/ч
1	2	3	4	5	6
н-Гексан ↔ 3-метилпентан	-4400,00	н-Гексан	0,2615	10,93	-48106,59
н-Гексан ↔ 2-метилпентан	-7100,00	н-Гексан	0,2615	10,93	-77626,54
2-метилпентан ↔ 2,3-диметилбутан	-350000,00	2-метилпентан	0,0616	2,58	-901423,60
н-Гексан ↔ Гексен-1+H ₂	130000,00	н-Гексан	0,2615	10,93	142133,95
2-метилпентан ↔ 2-метилпентен-1+H ₂	120000,00	2-метилпентан	0,0616	2,58	309059,52
Циклогексан ↔ Бензол+3H ₂	210000,00	Циклогексан	0,1451	6,07	127392,51
Метилциклопентан ↔ Бензол+3H ₂	190000,00	Метилциклопентан	0,1451	6,07	115265,89
2-метилпентан ↔ 3-метилпентан	2700,00	2-метилпентан	0,0616	2,58	6953,84
3-метилпентан ↔ 2,2-диметилбутан	-14000,00	3-метилпентан	0,0616	2,58	-36056,94

Продолжение таблицы 8

1	2	3	4	5	6
22–диметилбутан ↔ 23–диметилбутан	7800,00	22–диметилбутан	0,0616	2,58	20088,87
3–метилпентан ↔ 3–метилпентен–1 + H ₂	130000,00	3–метилпентан	0,0616	2,58	334814,48
н–Гексан → 2Пропан	–40000,00	н–Гексан	0,2615	10,93	–437332,60
н–Гексан → Метан+Пентен–1	71000,00	н–Гексан	0,2615	10,93	776265,37
н–Гексан → Этан+Бутен–1	82000,00	н–Гексан	0,2615	10,93	896531,83
н–Гексан → Пропан+Пропен–1	84000,00	н–Гексан	0,2615	10,93	91839,46
н–Гексан → Бутан+Этилен	93000,00	н–Гексан	0,2615	10,93	101679,30
Бензол+Этилен ↔ Этилбензол	– 110000,00	Бензол	0,0186	0,78	–85543,26
Гептан ↔ Тoluол+4H ₂	240000,00	Гептан	0,0143	0,60	143491,92
Гексен–1 ↔ Циклогексан	–81000,00	Гексен–1	0,0000	0,00	0,00
2–метилпентен–1 ↔ Метилциклопентан	–55000,00	2–метилпентен–1	0,0000	0,00	0,00
3–метилпентен–1 ↔ Метилциклопентан	–62000,00	3–метилпентен–1	0,0000	0,00	0,00
Сумма					1479427,40

Т.к. суммарный эффект протекающих реакций получился эндотермическим, следовательно, тепло в ходе процесса поглощается, и необходимо определить падение температуры от входа к выходу. Для этого запишем уравнение, которое позволит определить конечную температуру процесса (7):

$$Q = G \cdot c_p \cdot \Delta T \quad (7)$$

где Q – количество отданного тепла в ходе реакции, кДж/ч;

G – массовый расход сырья, кг/ч;

c_p – удельная теплоемкость углеводородного сырья, кДж/(кг · К);

$\Delta T = T_1 - T_2$ – падение температуры в ходе процесса, К;

T_1 – температура на входе в реактор, К;

T_2 – температура на выходе из реактора, К.

Для определения конечной температуры процесса необходимо найти удельную теплоемкость углеводородного сырья. Удельная теплоемкость паров нефтепродуктов рассчитали по формуле Бальке [30]:

$$c_p = ((4 - \rho_{15}^{15})/1541) \cdot (1,8 \cdot T + 211) \quad (8)$$

где ρ_{15}^{15} – плотность компонента при 15°C (9):

$$\rho_{15}^{15} = \rho_4^{20} + 5 \cdot \alpha \quad (9)$$

где α – температурная поправка;

T – температура процесса, К.

Для выбранных ЦК нашли стандартные значения плотностей при 20°C и с помощью формулы пересчета рассчитали плотность каждого компонента при 15°C. Далее нашли значение удельной теплоемкости для каждого компонента, а общее значение теплоемкости $c_{p \text{ общ}}$ определили по аддитивности этого свойства по формуле (10):

$$c_{p \text{ общ}} = c_{p i} \cdot X_i \quad (10)$$

Расчет суммарной теплоемкости приведен в таблице 9.

Таблица 9 – Расчет удельной теплоемкости компонентов

Реакция	Содержание ЦК, м.д.	ЦК	ρ_4^{20} ЦК, кг/м ³	ρ_{15}^{15} ЦК, кг/м ³	c_p , кДж/(кг · К)
н-Гексан ↔ 3-метилпентан	0,2615	н-Гексан	662,66	667,41	2,82
н-Гексан ↔ 2-метилпентан	0,2615	н-Гексан	662,66	667,41	2,82
2-метилпентан ↔ 3-диметилбутан	0,0616	2-метилпентан	656,51	661,32	2,83
н-Гексан ↔ Гексен-1+H ₂	0,2615	н-Гексан	662,66	667,41	2,82
2-метилпентан ↔ 2-метилпентен-1+H ₂	0,0616	2-метилпентан	656,51	661,32	2,83
Циклогексан ↔ Бензол+3H ₂	0,1451	Циклогексан	781,82	785,78	2,72
Метилциклопентан ↔ Бензол+3H ₂	0,1451	Метилциклопентан	752,07	756,22	2,75
2-метилпентан ↔ 3-метилпентан	0,0616	2-метилпентан	656,51	661,32	2,83
3-метилпентан ↔ 2,2-диметилбутан	0,0616	3-метилпентан	667,68	672,43	2,82
2,2-диметилбутан ↔ 2,3-диметилбутан	0,0616	2,2-диметилбутан	652,57	657,38	2,83
3-метилпентан ↔ 3-метилпентен-1+H ₂	0,0616	3-метилпентан	667,68	672,43	2,82
н-Гексан → 2Пропан	0,2615	н-Гексан	662,66	667,41	2,82
н-Гексан → Метан+Пентен-1	0,2615	н-Гексан	662,66	667,41	2,82
н-Гексан → Этан+Бутен-1	0,2615	н-Гексан	662,66	667,41	2,82
н-Гексан → Пропан+Пропен-1	0,2615	н-Гексан	662,66	667,41	2,82
н-Гексан → Бутан+Этилен	0,2615	н-Гексан	662,66	667,41	2,82
Бензол+Этилен ↔ Этилбензол	0,0186	Бензол	882,19	885,49	2,64
Гептан ↔ Толуол+4H ₂	0,0143	Гептан	686,82	691,44	2,80
Гексен-1 ↔ Циклогексан	0,0000	Гексен-1	671,65	676,33	2,82
2-метилпентен-1 ↔ Метилциклопентан	0,0000	2-метилпентен-1	684,58	689,21	2,80
3-метилпентен-1 ↔ Метилциклопентан	0,0000	3-метилпентен-1	672,35	677,03	2,81
Сумма	1,0000				12,53

Тогда температура на выходе из реактора будет равна:

$$T_2 = T_1 - (Q/(G \cdot c_{p \text{ общ}})) = (335+273) - (1,48 \cdot 10^6 / (3500 \cdot 12,53)) = 574,27 \text{ К или } 301,27^\circ\text{C}.$$

Программное обеспечение HYSYS просчитало температуру выходного потока на уровне 330°C , следовательно, рассчитанное по формуле значение температуры имеет небольшое отклонение, но в целом значение адекватно описывает процесс, что дает нам возможность судить о том, что расчет проведен верно.

3. 4. 3 Определение геометрических размеров реактора

Для идентификации геометрических размеров реактора, первоначально было необходимо определить объем катализатора в реакторе по формуле (11):

$$V_{\text{кат}} = G_c / \rho_c \cdot \omega_c \quad (11)$$

где G_c – расход сырья, кг/ч;

ρ_c – плотность сырья, кг/м³;

ω_c – объемная скорость подачи сырья, ч⁻¹.

$$V_{\text{кат}} = 30000 \cdot 1000 / 365 \cdot 24 \cdot 697 \cdot 2 = 2,46 \text{ м}^3.$$

Суммарный объем газов при температуре 608 К (335°C) и давлении 1,5 МПа рассчитали по формуле (12):

$$\sum V = m/M \cdot (22,4 \cdot P_0 \cdot T) / (P \cdot T_0) \quad (12)$$

где m – массовый расход сырья, кг/ч;

P, P_0 – рабочее и нормальное давление, 1500 и 101,325 кПа;

T, T_0 – рабочая и нормальная температура, 608 и 273К.

$$\sum V = 30000 \cdot 1000 / (365 \cdot 24 \cdot 83,72) \cdot (22,4 \cdot 1,01 \cdot 608) / (15 \cdot 273) = 134 \text{ м}^3/\text{с}.$$

Приняли линейную скорость паров $v_{\text{паров}} = 10 \text{ м/с}$, тогда требуемое сечение реактора S :

$$S = \sum V / v_{\text{паров}} = 134 / 10 = 13,4 \text{ м}^2.$$

Диаметр реактора определили по формуле (13):

$$D = (4 \cdot S / 3,14)^{0,5} \quad (13)$$

$$D = (4 \cdot 13,4 / 3,14)^{0,5} = 4,18 \text{ м}.$$

А высота слоя катализатора:

$$H_{\text{кат}} = V_{\text{кат}} / S \quad (14)$$

$$H_{\text{кат}} = 2,46 / 13,4 = 0,18 \text{ м.}$$

3. 4. 4 Конструктивное оформление реактора

Для удобства графического представления был принят реактор со средними основными характеристиками продукта (после оптимизации) – ОЧ и относительный выход бензиновой фракции. Характеристики реактора: диаметр 0,60 м, высота 6 м, представлены в пункте 4.1.

Сначала, произвели выбор положения реактора. Приняли вертикальную ориентацию аппарата. Данный аппарат разместили на опорных лапах. Выбор типа лап осуществлялся исходя из максимального веса аппарата.

Катализатор, в свою очередь, располагается одной секцией на перфорированной решетке. Под слоем катализатора располагаются фарфоровые шары для предотвращения уноса катализатора. Шары и решетка защищают выводной штуцер реактора от попадания на него катализатора вместе с продуктами реакции.

Штуцер для ввода сырьевой смеси располагается в верхней части в центре крышки аппарата, вывод продуктов осуществляется внизу реактора через штуцер вывода. Диаметр необходимых штуцеров определили по формуле (15):

$$d_{\text{шт}} = \sqrt{\frac{V}{0,785 w_{\text{шт}}}} \quad (15)$$

где $w_{\text{шт}}$ – скорость паровой фазы в штуцере.

Т.к. мы уже приняли, что скорость газовой смеси 10 м/с, то тогда рассчитали штуцера для ввода исходной смеси и вывода продуктов реакции:

$$d_{\text{шт}} = \sqrt{\frac{V}{0,785 w_{\text{шт}}}} = \sqrt{\frac{127}{0,785 \cdot 10 \cdot 3600}} = 0,067 \text{ м, принимаем } d_{\text{шт}} = 80 \text{ мм.}$$

Для равномерной подачи сырья в реактор установили распределительное устройство. Выгрузка катализатора будет осуществляться

через люки в нижней части аппарата на боковой стенке обечайки, а загрузка через съемную крышку, которая крепится к корпусу на фланцах.

Для цилиндрического реактора толщину обечайки определили по формуле (16):

$$S > p \cdot D / (2 \cdot [\sigma] \cdot \varphi - p) + c \quad (16)$$

где p – давление в аппарате, 1,5 МПа;

$[\sigma]$ – допускаемое напряжение для стали 12Х18Н10Т, принимаем 110 МПа;

φ – коэффициент ослабления сварного шва, принимаем 0,95;

c – поправка на коррозию, принимаем 0,002 м.

$S > 1,5 \cdot 0,6 / (2 \cdot 110 \cdot 0,95 - 1,5) + 0,002 = 0,0064$ м или 6,4 мм. Приняли толщину корпуса 10 мм согласно рекомендациям [32].

Наиболее распространенными в химическом машиностроении являются эллиптические отбортованные крышки по ГОСТ 6533 – 78 [31]. Из конструктивных соображений стенку крышки приняли равной толщине стенки обечайки $s_d = s = 10$ мм.

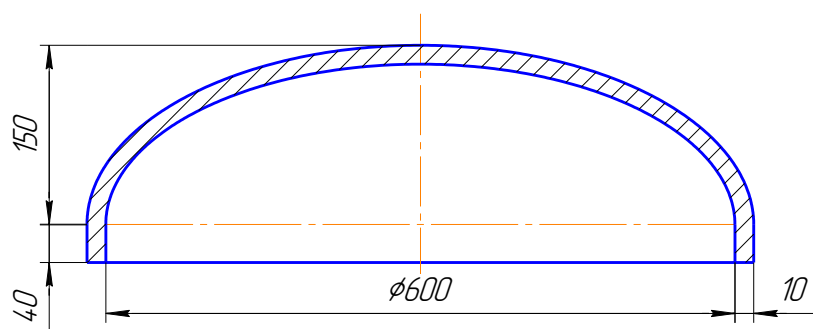


Рисунок 29 – Крышка аппарата [31]

К характеристикам крышки относят:

- высота борта днища, 40 мм;
- масса днища, 35,5 кг;
- объем днища, 0,0356 м³.

Соединение обечайки с крышкой осуществляется с помощью плоских приварных фланцев по ОСТ 26 – 428 – 79 [31].

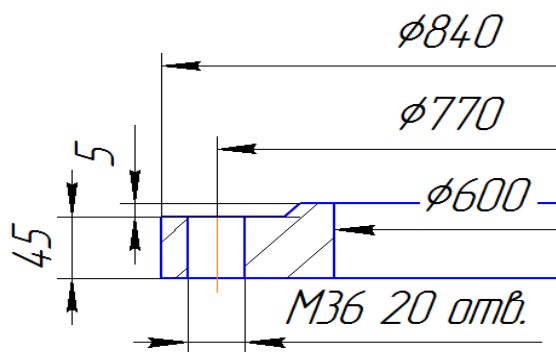


Рисунок 30 – Фланец для соединения крышки и обечайки

Далее произвели расчет массы аппарата для выбора опорных лап. Примерная масса аппарата складывается из следующих составляющих:

1) Масса обечайки:

$$m_{об} = 0,785 \cdot (D_n^2 - D_{вн}^2) H_{об} \cdot \rho \quad (17)$$

где D_n – наружный диаметр аппарата, $D_n = 0,62$ м;

$D_{вн}$ – внутренний диаметр аппарата, $D_{вн} = 0,60$ м;

$H_{об}$ – высота цилиндрической части аппарата, $H_{об} = 6,10$ м;

ρ – плотность стали, $\rho = 7900$ кг/м³.

$$m_{об} = 0,785 \cdot (0,62^2 - 0,60^2) \cdot 6,10 \cdot 7900 = 923,03 \text{ кг.}$$

2) Масса катализатора:

$$m_{кат} = V_{кат} \cdot \rho_{кат} \quad (18)$$

где $V_{кат}$ – объем реакционной зоны, м³;

$\rho_{кат}$ – насыпная плотность катализатора, кг/м³.

$$m_{кат} = V_{кат} \cdot \rho_{кат} = 1,6956 \cdot 730 = 1237,8 \text{ кг.}$$

Приняли, что масса всех вспомогательных устройств (штуцеров, люков и т.д.) составляет 20% от основной массы аппарата. Тогда:

$$m_p = m_{об} + m_{кат} + 2 \cdot m_d = 1,2 \cdot (923,03 + 1237,8 + 2 \cdot 35,5) = 2678,20 \text{ кг.}$$

Массу воды при гидроиспытании определили по формуле (19):

$$m_b = 1000 \cdot (0,785 \cdot D^2 \cdot H_{об} + 2 \cdot V_d) \quad (19)$$

где V_d – объем днища, м³.

$$m_b = 1000 \cdot (0,785 \cdot D^2 \cdot H_{об} + 2 \cdot V_d) = 1000 \cdot (0,785 \cdot 0,60^2 \cdot 6,10 + 2 \cdot 0,0356) = 1795,06 \text{ кг.}$$

Максимальный вес аппарата:

$$m_{\max} = m_p + m_b = 2678,20 + 1795,06 = 4473,30 \text{ кг} = 0,040 \text{ МН}.$$

Размеры лапы, которая сможет выдержать вес всего аппарата, приведены на рисунке 31. При расчете лап определили размеры ребер. Отношение вылета к высоте ребра l/h рекомендуют принимать равным 0,5. Толщину ребра определили по формуле (20):

$$\delta = \frac{G \cdot 2,24}{k \cdot n \cdot z \cdot l \cdot \sigma} + C_k + C_{окр}, \quad (20)$$

где G – максимальный вес аппарата, МН;

n – число лап, принимаем 2;

z – число ребер на одной лапе, принимаем 2;

l – вылет опоры, м;

σ – допускаемое напряжение на сжатие, принимаем 100 МН/м^2 .

Коэффициент k вначале приняли равным 0,6, а затем уточнили по графику [32].

$$\delta = \frac{G \cdot 2,24}{k \cdot n \cdot z \cdot l \cdot \sigma} + C_k + C_{окр} = \frac{0,040 \cdot 2,24}{0,6 \cdot 2 \cdot 2 \cdot 0,1 \cdot 100} + 0,001 + C_{окр} = 0,005 \text{ м}.$$

Отношение $l/\delta = 0,1/0,005 = 20$. По графику проверили коэффициент k . Он принимает значение 0,3, поэтому пересчитали толщину ребра:

$$\delta = \frac{G \cdot 2,24}{k \cdot n \cdot z \cdot l \cdot \sigma} + C_k + C_{окр} = \frac{0,040 \cdot 2,24}{0,3 \cdot 2 \cdot 2 \cdot 0,1 \cdot 100} + 0,001 + C_{окр} = 0,010 \text{ м}.$$

Прочность сварного шва должна отвечать условию (21):

$$G/n \leq 0,7 \cdot L_{ш} \cdot h_{ш} \cdot \tau_{ш}, \quad (21)$$

где $L_{ш}$ – общая длина сварных швов, м;

$h_{ш}$ – катет сварного шва, принимаем 0,008 м;

$\tau_{ш}$ – допускаемое напряжение материала шва на срез, принимаем 80 МН/м^2 .

Общая длина сварного шва:

$$L_{ш} = 4 (h + \delta) = 4(0,2 + 0,010) = 0,84 \text{ м}.$$

Прочность сварного шва проверили по формуле (21):

$0,040 / 4 = 0,010 \text{ МН} < 0,7 \cdot 0,84 \cdot 0,008 \cdot 80 = 0,376 \text{ МН}$, т.е прочность обеспечена.

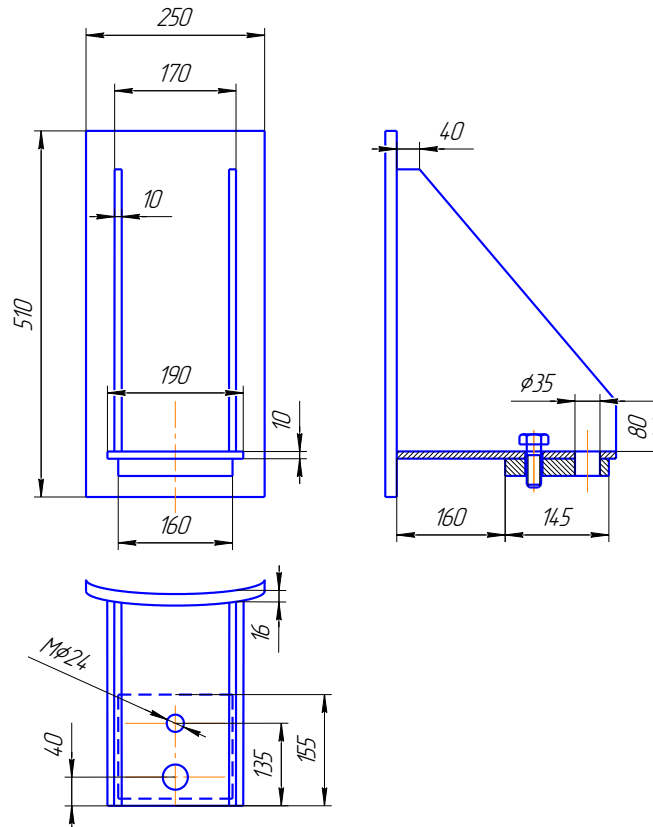


Рисунок 31 – Опорная лапа

Далее определили толщину слоя теплоизоляционного материала, покрывающего наружную поверхность аппарата, с целью снижения тепловых потерь и обеспечения требований безопасности и охраны труда при обслуживании теплоизолирующих установок. Толщину теплоизоляционного слоя определили по формуле (22):

$$\delta_{из} = \frac{\lambda_{из} \cdot (t_{cm} - t_{из})}{\alpha_n \cdot (t_{из} - t_{o.c})}, \quad (22)$$

где $\lambda_{из}$ – коэффициент теплопроводности изоляционного слоя, Вт/м²·К;

t_{cm} – температура наружной стенки корпуса, °С;

$t_{из}$ – температура поверхности изоляционного слоя, °С;

α_n – коэффициент теплоотдачи, определяющий суммарную скорость переноса теплоты конвекцией и тепловым излучением:

$$\alpha_n = 9,74 + 0,07 \cdot V_t. \quad (23)$$

где $V_t = t_{из} - t_{o.c}$.

В качестве теплоизоляционного материала выбрали совелит с коэффициентом теплопроводности $\lambda_{из} = 0,098 \text{ Вт/м}^2\cdot\text{К}$. Приняли $t_{o.c} = 20^\circ\text{C}$, $t_{из} = 45^\circ\text{C}$, $t_{cm} = 300^\circ\text{C}$. Тогда коэффициент теплоотдачи:

$$\alpha_n = 9,74 + 0,07 \cdot (45 - 20) = 11,49.$$

Толщина изоляции:

$$\delta_{из} = \frac{\lambda_{из} \cdot (t_{cm} - t_{из})}{\alpha_n \cdot (t_{из} - t_{o.c})} = \frac{0,098 \cdot (300 - 45)}{11,49 \cdot (45 - 20)} = 0,145 \text{ м или } 145 \text{ мм}.$$

Так как начальная температура реакции держится на уровне 335°C , то для всего реактора можно принять одну и ту же толщину изоляции.

3.5 Проверка модели на адекватность

В результате протекания процесса в модели реактора получена смесь следующего состава (таблица 10).

Таблица 10 – Компонентный состав полученной смеси

УВ	Состав, % масс.		
	T=335°C	T=395°C	T=405°C
1	2	3	4
23–диметилбутан	5,1	5,05	5,05
3–метилпентан	6,49	6,62	6,65
2–метилпентан	13,7	13,86	13,89
22–диметилбутан	13,12	12,54	12,45
Метилциклопентан	12,75	9,43	8,83
Циклогексан	3,88	2,67	2,47
Гексан	6,39	6,67	6,72
Водород	1,07	1,45	1,51
Бензол	12,51	16,87	17,64
Пропан	8,77	8,76	8,74
Метан	0,04	0,03	0,03
Этан	0,17	0,16	0,16
Бутан	5,21	5,2	5,2
Этен	0,02	0,02	0,02

Продолжение таблицы 10

1	2	3	4
Пропен	0,09	0,08	0,08
Бутен	0,13	0,11	0,11
Этилбензол	2,97	2,95	2,95
Пентен	0,16	0,14	0,14
Гептан	1,05	0,56	0,49
Толуол	6,37	6,83	6,88
2–метилпентен	0	0	0
Гексен	0	0	0
3–метилпентен	0	0	0

Результаты проверки модели реактора на адекватность экспериментальным данным приведены в таблицах 11 – 13.

Таблица 11 – Состав УВ групп в эксперименте и модели при 335°C

Группа УВ	Состав, % масс.		Относительная погрешность $\Delta = \left \frac{\text{эксп}-\text{модель}}{\text{модель}} \right * 100\%$
	Эксперимент	Модель	
Парафины	21,50	21,63	0,59
Изопарафины	42,77	38,42	11,3
Ароматика	19,23	21,85	12
Нафтенy	16,11	16,63	3,14
Олефины	0,40	0,40	0

Таблица 12 – Состав УВ групп в эксперименте и модели при 395°C

Группа УВ	Состав, % масс.		Относительная погрешность $\Delta = \left \frac{\text{эксп}-\text{модель}}{\text{модель}} \right * 100\%$
	Эксперимент	Модель	
Парафины	19,36	21,38	9,5
Изопарафины	35,11	38,07	7,8
Ароматика	32,47	26,65	21,8
Нафтенy	12,49	12,1	3,26
Олефины	0,57	0,35	63,4

С увеличением температуры до 395°C снижается выход парафинов нормального и изо – строения, нафтенов, и незначительно уменьшается концентрация олефинов, а выход ароматических соединений увеличивается.

Таблица 13 – Состав УВ групп в эксперименте и модели при 405°C

Группа УВ	Состав, % масс.		Относительная погрешность $\Delta = \left \frac{\text{эксп}-\text{модель}}{\text{модель}} \right * 100\%$
	Эксперимент	Модель	
Парафины	18,04	21,34	15,4
Изопарафины	42,17	38,04	10,8
Ароматика	30,41	27,47	10,7
Нафтены	8,92	11,3	21
Олефины	0,46	0,35	30,8

Дальнейший рост температуры до 405°C приводит к незначительному изменению выхода парафинов, олефинов и ароматических соединений, по сравнению с предыдущими показателями, повышается содержание изо–парафинов, снижается доля нафтенов.

Большие значения относительной погрешности объясняются тем, что эксперимент проводился для бензиновой фракции, а модель учитывает только превращения гексана. На данном этапе можно считать, что модель адекватна.

4 Моделирование и оптимизация

4. 1 Реакторный блок

Следующим шагом на пути оптимизации для определения конструктивных и технологических параметров процесса, был выбор параметров, которые позволили сформировать целевую функцию: ОЧ и относительный выход бензина. В качестве варьируемых параметров выбраны: температура процесса и объем реакционной зоны аппарата. На рисунках 32 и 33 отражена связь целевых параметров для различных значений варьируемых.

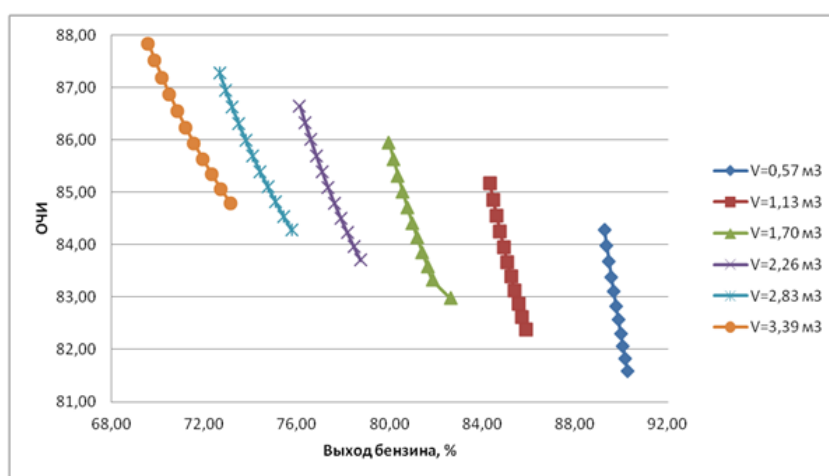


Рисунок 32 – Зависимость октанового числа от выхода бензина при изменении объема реактора

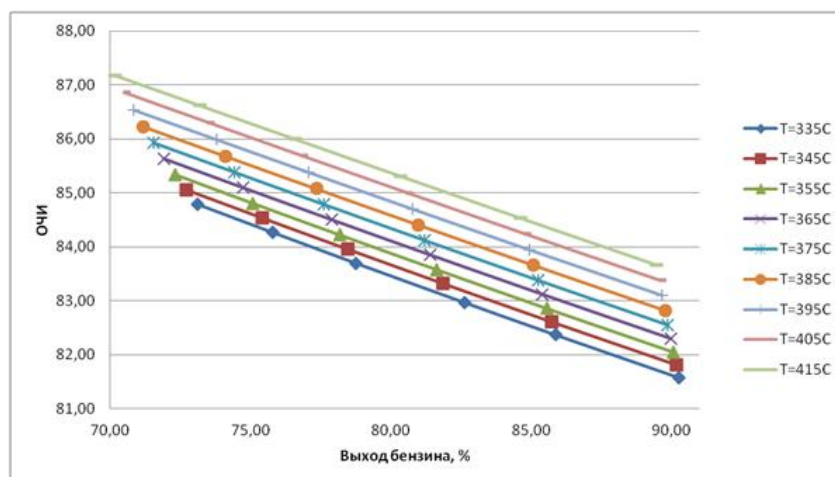


Рисунок 33 – Зависимость октанового числа от выхода бензина при изменении температуры

Из рисунков 32 и 33 следует, что при увеличении объема реактора и температуры процесса, выход бензиновой фракции уменьшается, а ОЧ возрастает. Следовательно, для графического построения выбрали реактор, обладающий средними целевыми характеристиками. Этот реактор имеет реакционный объем $V = 1,70 \text{ м}^3$, геометрические размеры: длина $L = 6 \text{ м}$, диаметр $D = 0,6 \text{ м}$.

Была сформирована целевая функция в безразмерной форме и выполнены расчеты на математической модели в интервалах: температура – $T=335 \div 435^\circ\text{C}$ и объем реактора – $V_p=0,57 \div 3,39 \text{ м}^3$. Вид целевой функции в пространстве оптимизируемых параметров представлен на рисунке 34. Расчеты представлены в Приложении В.

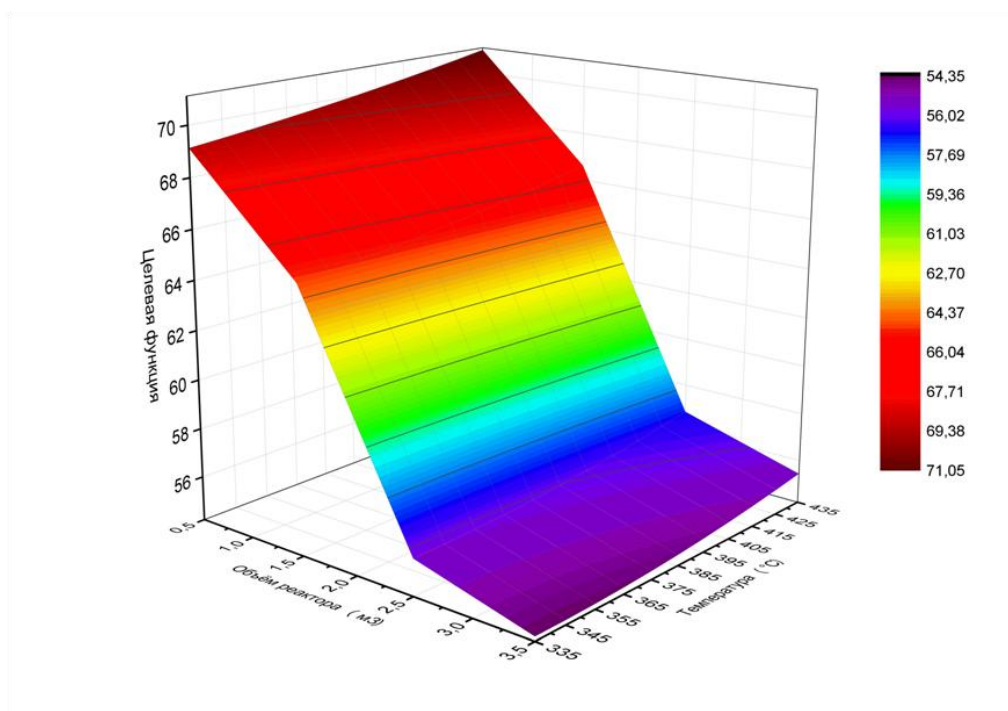


Рисунок 34 – Вид целевой функции

Максимуму целевой функции соответствует $V_p = 0,5 \text{ м}^3$, $T = 435^\circ\text{C}$, на основании чего предложена конструкция аппарата (для средних целевых характеристик) и выбран оптимальный температурный режим при работе на максимальный выход или на максимальное ОЧ продукта. Безразмерный вид целевой функции делает ее удобным инструментом для выполнения экономической оптимизации и оценки энергоэффективности.

4.2 Узел фракционирования

Следующим не маловажным объектом в технологической схеме обогащения УВ на цеолитах является узел фракционирования.

Для реализации второй составляющей цели – оптимизации процесса производства высокооктановых бензинов, инженерным коллективом ООО НПЦ “Ноосфера” была создана математическая модель узла фракционирования прямогонных бензиновых фракций процесса цеоформинга. На рисунке 35 представлена принципиальная схема узла фракционирования, разработанная в программной среде HYSYS Aspen Tech.

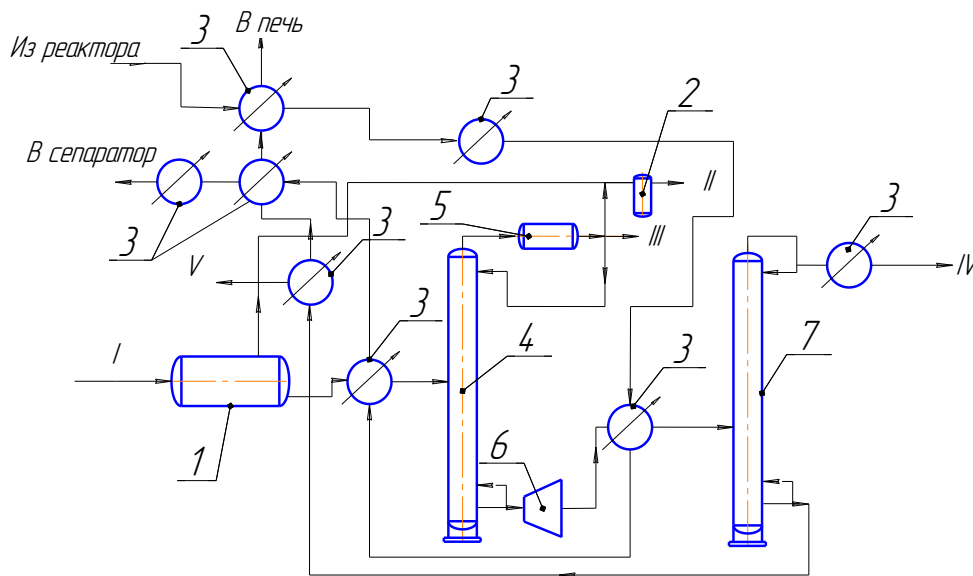


Рисунок 35 – Принципиальная схема узла фракционирования:

1 – сепаратор; 2 – емкость для сбора углеводородного газа; 3 – система рекуперативных теплообменников; 4 – стабилизационная колонна; 5 – конденсатор; 6 – расширитель; 7 – ректификационная колонна; потоки: I – подогретое исходное сырье; II – углеводородный газ; III – сжиженный газ; IV – бензин; V – кубовый продукт [59]

Основной целью оптимизации было определение оптимальных параметров работы узла выделения товарного бензина, схема которого представлена на рисунке 36. Основное ограничение при его оптимизации: соответствие ГОСТ 51866 – 2002 фракционного состава продуктового бензина [33].

Для предоставленного катализата был произведен подбор параметров в модели для получения фракционного состава продуктового бензина, соответствующего требованиям ГОСТ 51866 – 2002. Параметры работы основных аппаратов узла фракционирования и их продуктов представлены в Приложении Г.

Профили давления, температуры и расходы орошения в колоннах были выбраны в качестве основных варьируемых параметров в модели. В результате расчетов установлено, что существенное влияние на состав конечного продукта оказывает давление в колоннах стабилизации и ректификации [59].

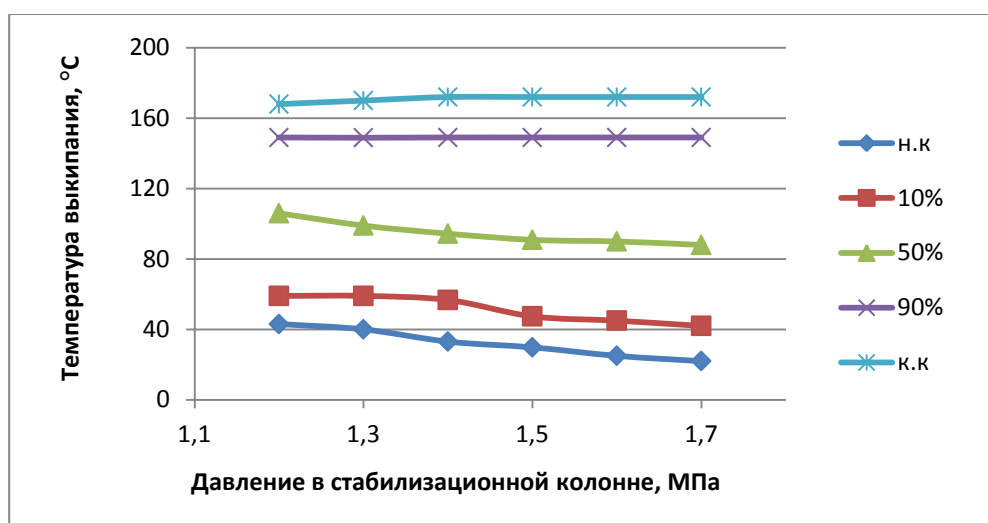


Рисунок 36 – Зависимость температур выкипания от давления в стабилизационной колонне

Повышение давления в колонне стабилизации приводит к изменению фракционного состава товарного бензина, а именно к снижению температуры начала кипения и температур выкипания 10% и 50% объемных (рисунок 36). Повышение давления в колонне ректификации ведет к снижению температуры конца кипения бензина и выкипания 90% объемных (рисунок 37).

Анализ полученных данных позволил сделать вывод о том, что с ростом давления в колоннах выход товарного бензина также возрастает, а выход тяжелого остатка падает.

В таблице 14 приведены фракционные разгонки катализата, полученного при 365°C, и состав целевого продукта, а также давление насыщенных паров и

плотность, соответствующие оптимальным параметрам работы узла фракционирования.

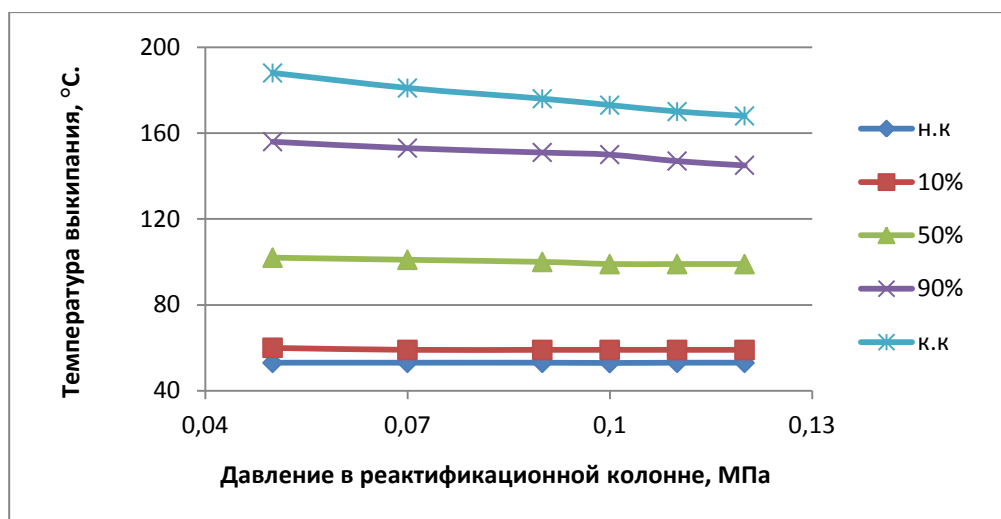


Рисунок 37 – Зависимость температур выкипания от давления в реактификационной колонне

Таблица 14 – Сравнение составов катализаторов до и после фракционирования

Пределы выкипания, °C	ГОСТ Р51866 – 2002	Катализат	Бензин
$T_{нк}$	≤ 30	34,0	29,8
10%	≤ 70	51,0	47,4
50%	≤ 120	95,0	90,9
90%	≤ 180	149,0	149,2
$T_{кк}$	≤ 205	172,0	172,0
Давление насыщенных паров, кПа	≤ 80	60, 9	70,7
Плотность при 20°C, кг/м ³	725 – 780	706	702

Техническим регламентом Постановление №118 [34], обозначен для бензинов только такой параметр, как давление насыщенных паров. Поэтому была принята в качестве ориентира следующая последовательность действий при анализе результатов оптимизации: во – первых, ориентировались на давление насыщенных паров, во – вторых, на фракционный состав, т.к. он является важной характеристикой для бензинов, и, наконец, самый последний параметр – это плотность.

На основании полученных данных можно сделать вывод, что подбор оптимальных параметров процесса цеоформинга является актуальным, т.к. при значительном изменении параметров процесса можно с большой вероятностью получить бензины, которые соответствуют по двум из трех критериев качества бензинам, регламентированным государственным стандартом.

5. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

В настоящее время, одной из основных задач химической технологии топлива является улучшение качества топлива путем внедрения на российских предприятиях технологий мирового уровня. К таким процессам можно отнести процесс переработки бензиновых фракций на цеолитсодержащих катализаторах.

Бензин является самым ценным товарным продуктом при первичной перегонки нефти на нефте – перерабатывающих заводах (НПЗ), поэтому задача проектирования сводится к созданию установки, на которой можно было бы получать высококачественный товарный бензин, близкий по основным параметрам к требованиям ГОСТ 51866 – 2002.

Правильный подбор условий проведения процесса определяет качество продуктов и эффективность проведения процесса. Поэтому целью раздела “Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение” является обоснование целесообразности разработки модели реактора и узла фракционирования, которая будет отвечать требованиям ресурсоэффективности.

5. 1 Предпроектный анализ

5. 1. 1 Потенциальные потребители результатов исследования

Каждое предприятие стремится с минимальными затратами получить как можно больше автомобильного бензина, отвечающего современным требованиям. В связи с этим, целевым рынком для результатов исследования будут Российские НПЗ. Сегментируем рынок услуг по разработке оптимального процесса по следующим критериям: размер НПЗ и вид продукции, на который направлена его деятельность. Карта сегментирования представлена на рисунке 38.

		Вид целевой продукции		
		бензин	дизельное топливо	сжиженный газ
Размер компании	Крупные			=====
	Средние			
	Мелкие			

ОАО “ТомскНИПИнефть”	ООО “Томскнефтепроект”	ООО “ТюменНИИгипрогаз”
	=====	

Рисунок 38 – Карта сегментирования рынка услуг по разработке оптимального процесса облагораживания бензинов

В результате сегментирования выявили, что основными сегментами рынка являются НПЗ среднего и мелкого размера, основная деятельность которых направлена на производство бензина. А также крупные и средние предприятий, которые производят дизельное топливо и сжиженный газ соответственно.

Т.к. задачей магистерской диссертации является определение оптимальных конструктивных и технологических параметров работы реакторного оборудования и оптимизация узла фракционирования, которые позволят производить бензин с максимальными характеристиками, то основной сегмент рынка, на который мы будем ориентироваться – это мелкие и средние НПЗ, производящие преимущественно бензин. В будущем же станет актуален вопрос применения данной разработки и для крупных НПЗ.

5. 1. 2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения позволяет провести оценку сравнительной эффективности научной разработки и определить направления для ее будущего повышения. Целесообразно проводить данный анализ с помощью оценочной карты, которая приведена в таблице 15.

Таблица 15 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		Б _ф	Б _{ф1}	Б _{ф2}	К _ф	К _{ф1}	К _{ф2}
Технические критерии оценки ресурсоэффективности							
Повышение производительности труда пользователя	0,10	5	5	3	0,50	0,50	0,3
Удобство в эксплуатации	0,10	5	3	5	0,50	0,30	0,5
Качество продукта	0,30	5	4	3	1,50	1,20	0,90
Стадийность	0,10	5	4	3	0,50	0,40	0,30
Длительность производственного цикла	0,10	5	3	4	0,50	0,30	0,40
Экономические критерии оценки эффективности							
Конкурентоспособность продукта	0,10	5	4	4	0,50	0,40	0,40
Уровень проникновения на рынок	0,07	5	4	5	0,35	0,28	0,35
Цена	0,09	4	3	4	0,36	0,27	0,36
Предполагаемый срок эксплуатации	0,04	4	3	4	0,16	0,12	0,16
Итого	1,00				4,87	3,77	3,67

К конкурентным преимуществам производимого продукта – бензина, можно отнести: высокое качество продукта, минимальная стадийность процесса, сокращение производственного цикла, высокую конкурентоспособность продукта и уровень проникновения на рынок. Эти качества помогут завоевать доверие покупателей путем предложения товара высокого качества со стандартным набором определяющих его параметров.

5. 1. 3 SWOT – анализ

SWOT представляет собой комплексный анализ инженерного проекта. SWOT – анализ применяют для того, чтобы перед организацией или менеджером проекта появилась отчетливая картина, состоящая из лучшей

возможной информации и данных, а также сложилось понимание внешних сил, тенденций и подводных камней, в условиях которых научно – исследовательский проект будет реализовываться. Анализ проводился в несколько этапов.

Таблица 16 – Матрица SWOT

	Сильные стороны научно – исследовательского проекта: С1. Простота применения С2. Адекватность разработки С3. Актуальность исследования для нефтеперерабатывающей промышленности С4. Более низкие эксплуатационные расходы и капитальные вложения по сравнению с другими технологиями	Слабые стороны научно – исследовательского проекта: Сл1. Отсутствие прототипа научной разработки Сл2. Отсутствие сертификации Сл3. Отсутствие необходимого оборудования для проведения испытания опытного образца Сл.4 Отсутствие бюджетного финансирования.
Возможности: В1. Использование инновационной инфраструктуры ТПУ В2. Использование инфраструктуры ООО «АНГК» В3. Появление потенциального спроса на новые разработки В4. Уменьшение значимости или достоинства конкурентных разработок	Простота применения и адекватность модели может вызвать спрос на нее. Кроме того, унифицированность и адекватность разработки может увеличить конкурентоспособность разработки. Низкие затраты проекта могут привлечь больше сотрудников и исполнителей.	При снижении конкурентоспособности подобных разработок и при появлении спроса на новые может появиться возможность использования данной НИР в компаниях уже использующих подобные методы переработки, для совершенствования технологий.
Угрозы: У1. Отсутствие спроса на новые технологии У2. Значительная конкуренция У3. Введения дополнительных государственных требований к сертификации У4. Несвоевременное финансовое обеспечение научного исследования со стороны государства	1. Продвижение программы с целью создания спроса 2. Создание конкурентных преимуществ готового продукта 3. Сертификация и стандартизация продукта	1. Отсутствие спроса на новые технологии производства 2. Развитая конкуренция технологий производства 3. Отсутствие необходимого оборудования для проведения эксперимента

Первый этап заключался в описании сильных и слабых сторон проекта, в выявлении возможностей и угроз для реализации проекта, которые проявились или могут появиться в его внешней среде. Результаты первого этапа SWOT – анализа представлены в таблице 16.

Таблица 17 – Интерактивная матрица проекта

Сильные стороны проекта					
Возможности проекта		C1	C2	C3	C4
	B1	–	–	+	+
	B2	–	–	+	+
	B3	+	+	+	–
	B4	+	+	+	–
Сильные стороны проекта					
Угрозы проекта		C1	C2	C3	C4
	У1	0	+	0	–
	У2	+	+	+	+
	У3	–	–	–	0
	У4	–	–	–	–
Слабые стороны проекта					
Возможности проекта		Сл1	Сл2	Сл3	Сл4
	B1	–	–	–	+
	B2	–	–	0	+
	B3	+	+	+	0
	B4	+	+	–	–
Слабые стороны проекта					
Угрозы проекта		Сл1	Сл2	Сл3	Сл4
	У1	+	+	+	0
	У2	0	+	0	–
	У3	–	0	–	–
	У4	–	+	–	+

После того как сформулировали четыре области SWOT, перешли к реализации второго этапа, который состоял в выявлении соответствия сильных и слабых сторон научно – исследовательского проекта внешним условиям окружающей среды. Это соответствия или несоответствия должны помочь выявить степень необходимости проведения стратегических изменений. Интерактивная матрица проекта представлена в таблице 17.

В рамках данного этапа построили интерактивную матрицу проекта. Ее использование помогает разобраться с различными комбинациями взаимосвязей областей матрицы SWOT.

В случае, когда две возможности сильно коррелируют с одними и теми же сильными сторонами, с большой вероятностью можно говорить об их единой природе. В этом случае, возможности описываются следующим образом: B1B2C3C4. В рамках третьего этапа была составлена итоговая матрица SWOT – анализа, которая приведена в таблице 18.

Таблица 18 – SWOT – анализ

	Сильные стороны научно – исследовательского проекта: С1. Простота применения С2. Адекватность разработки С3. Актуальность исследования для нефтеперерабатывающей промышленности С4. Более низкие эксплуатационные расходы и капитальные вложения по сравнению с другими технологиями	Слабые стороны научно – исследовательского проекта: Сл1. Отсутствие прототипа научной разработки Сл2. Отсутствие сертификации Сл3. Отсутствие необходимого оборудования для проведения испытания опытного образца Сл.4 Отсутствие бюджетного финансирования.
Возможности: В1. Использование инновационной инфраструктуры ТПУ В2. Использование инфраструктуры ООО «АНГК» В3. Появление потенциального спроса на новые разработки В4. Уменьшение значимости или достоинства конкурентных разработок	Простота применения, адекватность модели, актуальность исследования для предприятий увеличит спрос и конкурентоспособность НИР (В3В4С1С2). При подключении в работу новых разработок уменьшаются расходы и капитальные вложения.	Помощь в финансировании проекта и его сертификации могут оказать инновационные инфраструктуры (В1В2Сл2Сл4). Необходимо снизить конкурентоспособность подобных разработок и расширить использование данной НИР во многих компаниях (В3В4Сл1Сл3).
Угрозы: У1. Отсутствие спроса на новые технологии У2. Значимая конкуренция У3. Введения дополнительных государственных требований к	Актуальность исследования, простота и адекватность математической модели позволяют повысить спрос и конкуренцию разработки, что уменьшает влияние финансирования	Отсутствие прототипа, сертификации научной разработки, невозможность использования в компаниях с традиционными методами обработки нефти приведет к

сертификации У4. Несвоевременное финансовое обеспечение научного исследования со стороны государства	(С1С2С3У1У2У4). В силу малой затратности проекта представляется возможность вложения дополнительных денежных средств в другие услуги, такие как сертификация (С4У3).	отсутствию спроса и отсутствию конкуренции проекта (У1У2Сл1Сл2Сл3), а отсутствие финансирования приведет к невозможности получения сертификации (У3Сл4).
--	---	---

5. 1. 4 Оценка готовности проекта к коммерциализации

На какой бы стадии жизненного цикла не находилась научная разработка полезно оценить степень ее готовности к коммерциализации и выяснить уровень собственных знаний для ее проведения (или завершения). Для этого заполнили специальную форму, содержащую показатели о степени проработанности проекта с позиции коммерциализации и компетенциям разработчика научного проекта.

Таблица 19 – Бланк оценки степени готовности научного проекта к коммерциализации [60]

Наименование	Степень проработанности научного проекта	Уровень имеющихся знаний у разработчика
1	2	3
Определен имеющийся научно – технический задел	5	4
Определены перспективные направления коммерциализации научно – технического задела	5	4
Определены отрасли и технологии (товары и услуги) для предложения на рынок	5	5
Определена товарная форма научно – технического задела для представления на рынок	5	5
Определены авторы и осуществлена охрана их прав	4	3
Проведена оценка стоимости интеллектуальной собственности	3	3
Проведены маркетинговые исследования рынков сбыта	4	4

Продолжение таблицы 19

1	2	3
Разработан бизнес – план коммерциализации научной разработки	3	2
Определены пути продвижения научной разработки на рынок	4	4
Разработана стратегия (форма) реализации научной разработки	5	5
Проработаны вопросы международного сотрудничества и выхода на зарубежный рынок	2	2
Проработаны вопросы использования услуг инфраструктуры поддержки, получения льгот	1	1
Проработаны вопросы финансирования коммерциализации научной разработки	3	3
Имеется команда для коммерциализации научной разработки	3	2
Проработан механизм реализации научного проекта	4	4
Итого баллов	56	51

Так как значение получилось от 56 до 51 – то перспективность проекта можно считать выше средней. Для увеличения уровня перспективности необходимо, в первую очередь, проработать вопросы международного сотрудничества и выхода на зарубежный рынок, а также вопросы использования услуг инфраструктуры поддержки, получения льгот, для этого возможно необходимо привлечь сторонних специалистов.

5. 1. 5 Методы коммерциализации результатов научно – технического исследования

Задача данного раздела магистерской диссертации – выбор метода коммерциализации объекта исследования и обоснование его целесообразности. Для разработанной модели реактора облагораживания УВ на цеолитах методом коммерциализации был выбран инжиниринг.

Инжиниринг выделяют как самостоятельный вид коммерческих операций, который предполагает предоставление на основе договора

инжиниринга одной стороной (консультант), другой стороне (заказчику), комплекса или отдельных видов инженерно – технических услуг, связанных с проектированием и вводом объекта в эксплуатацию, с разработкой новых технологических процессов на предприятии заказчика, усовершенствованием имеющихся производственных процессов вплоть до внедрения изделия в производство и даже сбыта продукции [60].

Данный вид коммерциализации поможет в продвижении продукта на рынок товаров и услуг, и в случае успеха у одних, другие компании и организации могут заинтересоваться произведенной продукцией, тем самым возможно расширение рынка потребителей.

5. 2 Инициация проекта

Группа процессов инициации состоит из процессов, которые выполняются для определения нового проекта или новой фазы уже существующего [60]. В рамках процессов инициации определяются изначальные цели и содержание и фиксируются изначальные финансовые ресурсы. Определяются внутренние и внешние заинтересованные стороны проекта, которые будут взаимодействовать между собой и влиять на общий результат научного проекта. Данная информация закрепляется в Уставе проекта магистерской диссертации, и он должен иметь следующую структуру:

1) Цели и результаты проекта – привели информацию о заинтересованных лицах проекта (таблица 20), иерархию целей проекта и критерии достижения целей (таблица 21).

Таблица 20 – Заинтересованные стороны исследования

Заинтересованные стороны проекта	Ожидание заинтересованных сторон
ООО «АНГК»	Модель реактора превращений бензиновых фракций на цеолитсодержащих катализаторах

Таблица 21 – Цели и результат проекта

Цели исследования	Разработка модели реактора превращений УВ на цеолитсодержащих катализаторах
Ожидаемые результаты исследования	Получение результатов по работе с математической моделью
Критерии приемки результатов исследования	Адекватность полученных результатов
Требования к результатам исследования	Стандартизация готового продукта

2) Организационная структура проекта отражает состав рабочей группы, роль каждого участника, функции и трудозатраты в проекте.

Таблица 22 – Рабочая группа проекта

ФИО, основное место работы, должность	Роль в проекте	Функции	Трудозатраты, дни
1	2	3	4
Самборская Марина Анатольевна, НИ ТПУ, кафедра ХТТ и ХК, доцент, к.т.н.	Руководитель	Координация деятельности проекта	24
Романенкова Вера Вадимовна, НИ ТПУ, кафедра ХТТ и ХК, магистрант	Студент (магистрант)	Выполнение НИР	79
Криницына Зоя Васильевна, НИ ТПУ, кафедра менеджмента, доцент, к.т.н.	Эксперт проекта	Консультант ЭЧ	21
Чулков Николай Александрович, НИ ТПУ, кафедра ЭБЖ, доцент, к.т.н.	Эксперт проекта	Консультант СО	21
Итого:			145

5. 3. Планирование и формирование бюджета научного исследования

5. 3. 1 Контрольные события проекта

Контрольные события проекта необходимо закрепить в форме таблицы 9 с ключевыми событиями проекта, их датами и результатами, которые необходимо получить.

Таблица 23 – Контрольные события проекта

Контрольное событие	Дата	Результат
Разработка технического задания	20.03.2016	Бланк заданий на выполнение магистерской диссертации
Изучение литературы	03.04.2016	Литературный обзор
Формирование и расчет математической модели	17.04.2016	Расчетная часть
Оформление выводов	20.04.2016	Выводы по работе
Оценка эффективности производства и применения проектируемого процесса	08.05.2016	Раздел экономической эффективности проекта
Разработка социальной ответственности по теме	22.05.2016	Раздел социальная ответственность
Оформление пояснительной записки	31.05.2016	Магистерская диссертация

5. 3. 2 План проекта

Для выполнения научных исследований сформирована рабочая группа, в состав которой входят магистрант, научный руководитель, консультант по социальной ответственности (СО) и консультант по экономической части (ЭЧ) магистерской диссертации.

Составили перечень этапов и работ в рамках проведения научного исследования, провели распределение исполнителей по видам работ. Примерный порядок составления этапов и работ, распределение исполнителей по данным видам работ приведен в таблице 24.

Таблица 24 – Календарный план проекта

Название	Длительность, дни	Дата начала работ	Дата окончания работ	Состав участников
Разработка технического задания	7	14.03	20.03	Руководитель, консультант ЭЧ, СО, магистрант
Изучение литературы, составление литературного обзора	14	21.03	03.04	Магистрант
Формирование и расчет математической модели	14	04.04	17.04	Магистрант, руководитель
Обсуждение полученных результатов	3	18.04	20.04	Магистрант, руководитель
Оформление выводов	4	21.04	24.04	Магистрант
Оценка эффективности производства и применения проектируемого процесса	14	25.04	08.05	Магистрант, консультант по ЭЧ
Разработка социальной ответственности по теме	14	09.05	22.05	Магистрант, консультант СО
Оформление пояснительной записки	9	23.05	31.05	Магистрант

Диаграмма Ганта – это тип столбчатых диаграмм, который используется для иллюстрации календарного плана проекта, на котором работы по теме представляются протяженными во времени отрезками, характеризующимися датами начала и окончания выполнения данных работ. График строится в виде таблицы 25 с разбивкой по месяцам и декадам (10 дней) за период времени выполнения научного проекта.

Таблица 25 – Календарный план – график проведения магистерской диссертации

Вид работ	Исполнители	Т _к , кал.дн	Продолжительность выполнения работ								
			март		апрель			май			
Разработка технического задания	Руководитель, консультант ЭЧ, СО, магистрант	7									
Изучение литературы, составление литературного обзора	Магистрант	4									
Формирование и расчет математической модели	Магистрант, руководитель	4									
Обсуждение полученных результатов	Магистрант, руководитель	3									
Оформление выводов	Магистрант	4									
Оценка эффективности производства и применения проектируемого процесса	Магистрант, консультант по ЭЧ	14									
Разработка социальной ответственности по теме	Магистрант, консультант СО	14									
Оформление пояснительной записки	Магистрант	9									



– Руководитель



– Магистрант



– Консультант СО



– Консультант ЭЧ

5. 3. 3 Бюджет научного исследования (НИ)

В процессе формирования бюджета НИ используется следующая группировка затрат по статьям:

- материальные затраты НИ;
- затраты на специальное оборудование для научных работ;
- основная заработная плата исполнителей темы;
- дополнительная заработная плата исполнителей темы;
- отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления);
- затраты научные и производственные командировки (в работе не учитываются);
- контрагентные расходы (в работе не учитываются);
- накладные расходы.

5. 3. 3. 1 Расчет материальных затрат НИ

Т.к. для выполнения данной магистерской диссертации не требуется материальных затрат на исходное сырье, то для такой статьи затрат, как содержание, ремонт и эксплуатация оборудования, можно лишь принять небольшой процент от стоимости основного необходимого оборудования. Примем в размере 10%. Стоимость этих затрат учтем в пункте 5. 3. 3. 2.

5. 3. 3. 2 Расчет затрат на специальное оборудование для научных работ

В данную статью включают все затраты, связанные с приобретением специального оборудования. При приобретении спецоборудования необходимо учесть затраты по его доставке и монтажу в размере 15% от его цены. Стоимость оборудования, используемого при выполнении конкретного НИ и

имеющегося в данной научно – технической организации, учитывается в калькуляции в виде амортизационных отчислений.

Все расчеты по приобретению спецоборудования и оборудования, имеющегося в организации, но используемого для каждого исполнения конкретной темы, сведены в таблицу 26.

Таблица 26 – Расчет бюджета затрат на приобретение спецоборудования для научных работ

Наименование оборудования	Кол – во единиц оборудования	Цена единицы оборудования, руб.	Общая стоимость оборудования, руб.
Компьютер	1	30000	30000
Доставка, монтаж	1	4500	4500
Амортизационные отчисления	1	6000	6000
Содержание, ремонт и эксплуатация	2	3000	6000
Итого:			46500

5. 3. 3. 3 Основная заработная плата

Статья включает основную заработную плату работников [60], непосредственно занятых выполнением НИ, (включая премии, доплаты) и дополнительную заработную плату, также включается премия, выплачиваемая ежемесячно из фонда заработной платы в размере 20 –30 % от тарифа или оклада по формуле (24):

$$C_{зп} = Z_{осн} + Z_{доп} , \quad (24)$$

где $Z_{осн}$ – основная заработная плата;

$Z_{доп}$ – дополнительная заработная плата (12 – 20 % от $Z_{осн}$).

Основная заработная плата ($Z_{осн}$) руководителя от ТПУ рассчитывается по формуле (25):

$$Z_{осн} = Z_{дн} \cdot T_p , \quad (25)$$

где $Z_{осн}$ – основная заработная плата одного работника;

T_p – продолжительность работ, выполняемых научно – техническим работником, раб. дн. (таблица 22);

$З_{дн}$ – среднедневная заработная плата работника, руб.

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле (26):

$$З_{дн} = \frac{З_m \cdot M}{F_d}, \quad (26)$$

где $З_m$ – месячный должностной оклад работника, руб.;

M – количество месяцев работы без отпуска в течение года; при отпуске в 24 рабочих дня $M = 11,2$ месяца;

F_d – действительный годовой фонд рабочего времени научно – технического персонала, раб. дн.

Таблица 27 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Магистрант	Консультант ЭЧ	Консультант СО
Календарное число дней	365	365	365	365
Количество нерабочих дней				
– выходные дни	105	105	105	105
– праздничные дни	14	14	14	14
Потери рабочего времени				
– отпуск	24	60	24	24
– невыходы по болезни	0	0	0	12
Действительный годовой фонд рабочего времени	222	186	222	210

Месячный должностной оклад работника определяем по формуле (27):

$$З_m = З_б \cdot (k_{пр} + k_d) \cdot k_p, \quad (27)$$

где $З_б$ – базовый оклад, руб.;

$k_{пр}$ – премиальный коэффициент, равный 0,3 (т.е. 30% от $З_{тс}$);

k_d – коэффициент доплат и надбавок составляет примерно 0,2 – 0,5 (в НИИ и на промышленных предприятиях – за расширение сфер

обслуживания, за профессиональное мастерство, за вредные условия: 15 – 20 % от $Z_{тс}$);

k_p – районный коэффициент, равный 1,3 (для Томска).

Расчёт основной заработной платы приведён в таблице 28.

Таблица 28 – Расчёт основной заработной платы

Исполнители	$Z_{б,руб.}$	$k_{пр}$	k_d	k_p	$Z_{м,руб.}$	$Z_{дн,руб.}$	$T_{р.раб. дн.}$	$Z_{осн,руб.}$
Руководитель	23264,86	0,3	0,2	1,3	15122,16	762,92	24	18310,07
Магистрант	14584,32	0,3	0,2	1,3	9479,81	570,83	79	45095,34
Консультант ЭЧ	23264,86	0,3	0,2	1,3	15122,16	762,92	21	16021,31
Консультант СО	23264,86	0,3	0,2	1,3	15122,16	806,52	21	16936,82

5. 3. 3. 4 Дополнительная заработная плата научно – производственного персонала

Дополнительная заработная плата рассчитывается по формуле (28) исходя из 10 – 15% от основной заработной платы, работников, непосредственно участвующих в выполнении темы [60]:

$$Z_{доп} = k_{доп} \cdot Z_{осн} \quad (28)$$

где $Z_{доп}$ – дополнительная заработная плата, руб.;

$k_{доп}$ – коэффициент дополнительной зарплаты, примем 15%;

$Z_{осн}$ – основная заработная плата, руб.

Тогда общая заработная исполнителей работы представлена в таблице 29.

Таблица 29 – Общая заработная плата исполнителей НИ

Зарботная плата	Руководитель	Магистрант	Консультант ЭЧ	Консультант СО
Основная зарплата	18310,07	45095,34	16021,31	16936,82
Дополнительная зарплата	2746,51	6764,30	2403,20	2540,52
Зарплата исполнителя	21056,58	51859,65	18424,51	19477,34
Итого по статье $C_{зп}$	110818,08			

5. 3. 3. 5 Отчисления на социальные нужды

Величина отчислений во внебюджетные фонды определяется исходя из формулы (29):

$$C_{\text{внеб}} = k_{\text{внеб}} \cdot (З_{\text{осн}} + З_{\text{доп}}), \quad (29)$$

где $k_{\text{внеб}}$ – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды (пенсионный фонд, фонд обязательного медицинского страхования и пр.).

На 2016 г. в соответствии с Федеральным закона от 24.07.2009 № 212 – ФЗ установлен размер страховых взносов равный 30%. На основании пункта 1 ст.58 закона № 212 – ФЗ для учреждений осуществляющих образовательную и научную деятельность в 2014 году водится пониженная ставка – 27,1%. Отчисления во внебюджетные фонды представлены в таблице 30.

Таблица 30 – Отчисления во внебюджетные фонды

Исполнитель	Зарплата исполнителя, руб.	Отчисления во внебюджетные фонды, руб.
Руководитель проекта	21056,58	5706,33
Магистрант	51859,65	14053,96
Консультант ЭЧ	18424,51	4993,04
Консультант СО	19477,34	5278,36
Итого		30031,70

5. 3. 3. 6 Накладные расходы

Накладные расходы составляют 80 – 100 % от суммы основной и дополнительной заработной платы, работников, непосредственно участвующих в выполнение темы. Расчет накладных расходов ведется по формуле (30):

$$C_{\text{накл}} = k_{\text{накл}} \cdot (З_{\text{осн}} + З_{\text{доп}}), \quad (30)$$

где $k_{\text{накл}}$ – коэффициент, учитывающий накладные расходы, примем 80%.

На основании полученных данных по отдельным статьям затрат составляется калькуляция плановой себестоимости НИ, которая представлена в таблице 31.

Таблица 31 – Расчет бюджета затрат НИ

Наименование статьи	Сумма, руб.		
	Данный проект	Аналог 1	Аналог 2
Материальные затраты НТИ	6000,00	6000,00	6000,00
Специальное оборудование для научных работ	40500,00	40500,00	40500,00
Основная заработная плата исполнителей темы	96363,55	99567,13	98762,09
Дополнительная заработная плата исполнителей темы	14454,53	14935,07	14814,31
Отчисления во внебюджетные фонды	30031,70	31030,10	30779,21
Накладные расходы	88654,47	91601,76	90861,12
Итого плановая себестоимость	276004,25	283634,06	281716,73

Применим следующие обозначения для сравниваемых проектов:

Данный проект – разработка моделей в среде HYSYS;

Аналог 1 – разработка моделей в среде PRO II;

Аналог 2 – разработка моделей в среде Petro – SIM.

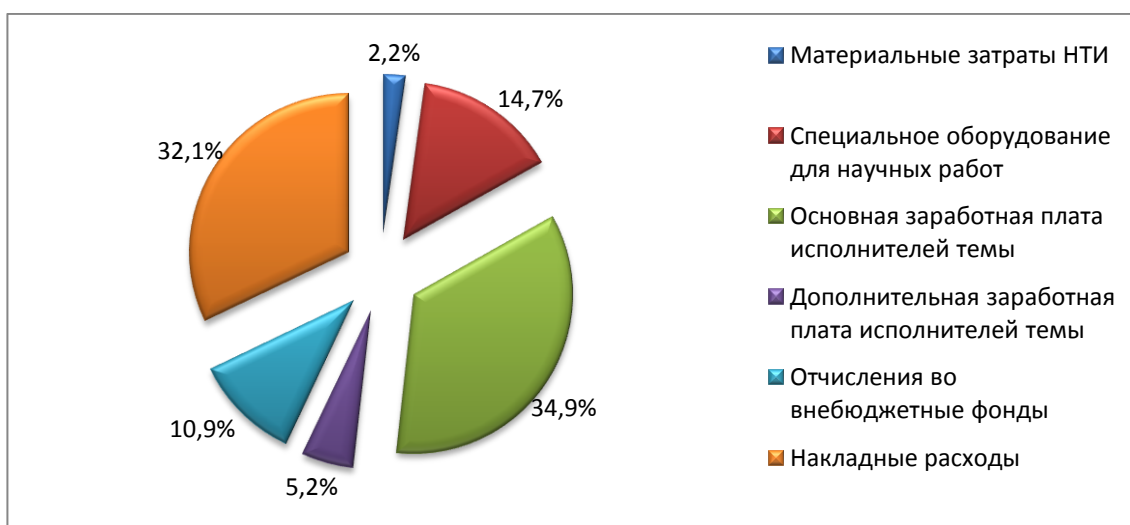


Рисунок 39 – Диаграмма бюджета НИ

Диаграмма, которая иллюстрирует бюджет научно – исследовательского проекта, представлена на рисунке 39.

5. 3. 4 Организационная структура проекта

В качестве организационной структуры проекта была выбрана проектная структура, т.к. основными критериями отнесения данной работы к этому виду структуры было: высокие обязательства по срокам исполнения работы, уникальность технологии и высокая взаимосвязь между отдельными частями проекта.



Рисунок 40 – Проектная структура проекта

5. 3. 5 Матрица ответственности

Для распределения ответственности между участниками проекта, сформировали матрицу ответственности, которая представлена в таблице 32.

Таблица 32 – Матрица ответственности

Этапы проекта	Руководитель	Магистрант	Консультант ЭЧ	Консультант СО
1	2	3	4	5
Разработка технического задания	О, И	С	О, И	О, И
Изучение литературы, составление литературного обзора	С	О, И	–	–

Продолжение таблицы 32

1	2	3	4	5
Формирование и расчет математической модели	О, С	О, И	–	–
Обсуждение полученных результатов	С	О, И	–	–
Оформление выводов	С	О, И	–	–
Оценка эффективности производства и применения проектируемого процесса	–	О, И	С	–
Разработка социальной ответственности по теме	–	О, И	–	С
Оформление пояснительной записки	–	О, И	–	–

5. 3. 6 План управления коммуникациями проекта

Была разработан план управления коммуникациями (таблица 33), который отражает требования к коммуникациям со стороны участников проекта.

Таблица 33 – План управления коммуникациями

Какая информация передается	Кто передает информацию	Кому передается информация	Когда передает информацию
Статус проекта	Руководитель проекта	Инициатору проекта	В конце срока выполнения
Обмен информацией о текущем состоянии	Исполнитель проекта	Руководителю/Экспертам проекта	Еженедельно
О выполнении контрольных точек	Исполнитель проекта	Руководителю/Экспертам проекта	Не позже контрольного события по графику

5. 4 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности разработки модели реактора цеоформинга

Определение сравнительной эффективности происходит на основе расчета интегрального показателя эффективности научного исследования. Его нахождение связано с определением двух средневзвешенных величин: финансовой эффективности и ресурсоэффективности.

Интегральный показатель финансовой эффективности научного исследования получают в ходе оценки бюджета затрат двух (или более) вариантов исполнения научного исследования. Для этого наибольший интегральный показатель реализации технической задачи принимается за базу расчета, с которым соотносятся финансовые значения по всем вариантам исполнения.

Интегральный финансовый показатель разработки определяется по формуле (31):

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\text{max}}} \quad (31)$$

где $I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i}$ – интегральный финансовый показатель разработки;

Φ_{pi} – стоимость i – го варианта исполнения;

Φ_{max} – максимальная стоимость исполнения научно – исследовательского проекта.

Для данного проекта: $I_{\text{финр}}^{\text{исп.}} = \frac{276004,25}{283634,06} = 0,97$.

Для первого аналога: $I_{\text{финр}}^{\text{исп.}} = \frac{283634,06}{283634,06} = 1$.

Для второго аналога: $I_{\text{финр}}^{\text{исп.}} = \frac{281716,73}{283634,06} = 0,99$.

Полученная величина интегрального финансового показателя разработки отражает соответствующее численное увеличение бюджета затрат разработки в размах (значение больше единицы), либо соответствующее

численное удешевление стоимости разработки в разгах (значение меньше единицы).

Интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов исполнения объекта исследования можно определить по формуле (32):

$$I_{pi} = \sum a_i \cdot b_i \quad (32)$$

где I_{pi} – интегральный показатель ресурсоэффективности для i – го варианта исполнения разработки;

a_i – весовой коэффициент i – го варианта исполнения разработки;

b_i^a, b_i^p – бальная оценка i – го варианта исполнения разработки, устанавливается экспертным путем по выбранной шкале оценивания.

Таблица 34 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Объект исследования	Весовой коэффициент параметра	Данный проект	Аналог 1	Аналог 2
Способствует росту производительности труда пользователя	0,20	5	4	4
Удобство в эксплуатации (соответствует требованиям потребителей)	0,15	4	4	4
Качество продукта	0,30	5	5	5
Простота эксплуатации	0,20	5	5	4
Длительность производственного цикла	0,15	4	4	4
Итого	1,00	4,7	4,5	4,3

$$I_{\text{данный проект}} = 5 \cdot 0,2 + 4 \cdot 0,15 + 5 \cdot 0,30 + 5 \cdot 0,20 + 4 \cdot 0,15 = 4,7;$$

$$I_{\text{аналог 1}} = 4 \cdot 0,2 + 4 \cdot 0,15 + 5 \cdot 0,30 + 5 \cdot 0,20 + 4 \cdot 0,15 = 4,5.$$

$$I_{\text{аналог 2}} = 4 \cdot 0,2 + 4 \cdot 0,15 + 5 \cdot 0,30 + 4 \cdot 0,20 + 4 \cdot 0,15 = 4,3.$$

Интегральный показатель эффективности вариантов исполнения разработки ($I_{\text{эфф}}$) определяется на основании интегрального показателя

ресурсоэффективности и интегрального финансового показателя по формуле (33):

$$I_{\text{эф}} = \frac{I_{\text{рi}}}{I_{\text{исп}}^{\text{финр}}} \quad (33)$$

Сравнение интегральных показателей эффективности вариантов исполнения разработки позволит определить сравнительную эффективность проекта и выбрать наиболее целесообразный вариант из предложенных (таблица 35). Сравнительная эффективность проекта ($\mathcal{E}_{\text{ср}}$) определяется по формуле (34):

$$\mathcal{E}_{\text{ср}} = \frac{I_{\text{исп.1}}}{I_{\text{исп.2}}} \quad (34)$$

Таблица 35 – Сравнительная эффективность разработки

Показатели	Аналог 1	Данный проект	Аналог 2
Интегральный финансовый показатель разработки	1,00	0,97	0,99
Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,5	4,7	4,3
Интегральный показатель эффективности	4,5	4,79	4,43
Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1,064		1,08

Интегральный финансовый показатель для данного проекта меньше, чем для первого и второго аналога, это говорит о том, что данный проект обладает меньшей стоимостью, чем два аналога этого проекта. Интегральный показатель ресурсоэффективности данного проекта больше, чем у аналогов. Интегральный показатель эффективности, рассчитанный на основании данных первых двух показателей, показывает преимущество данного проекта. Сравнение эффективности вариантов исполнения показало, что данный вариант решения с позиции финансовой и ресурсной эффективности является более приемлемым.

6. Социальная ответственность

Социальная ответственность подразумевает под собой комплекс обязанностей перед теми или иными общественными силами и институтами, которые способствуют в решении таких проблем населения, как: социальных, экономических, образовательных, здравоохранительных проблем, обеспечивая при этом основы функционирования современного общества.

В соответствии с [35], благодаря кардинальному повышению эффективности государственного управления и социальной ответственности возможна реализация следующих целей:

1. создание условий, содействующих формированию структурно развитой, обеспечивающей нужды страны и населения, конкурентоспособной экономики на базе рабочих мест, позволяющих эффективно использовать материальные и человеческие ресурсы для интересов всех субъектов страны;
2. обеспечение более высокого уровня жизни гражданам Российской Федерации и внедрение принципов достойного труда на основе подходов Международной организации труда.

В данном разделе магистерской диссертации объектом рассмотрения является производство высокооктановых бензинов на цеолитных катализаторах, а именно установка процесса “Цеоформинг” с применением разработанных моделей.

Рабочим местом является производственная площадка установки процесса ”Цеоформинг”. Конечным потребителем результата научно – исследовательской работы (НИР) является оператор, который с применением разработанной модели реакторного блока и узла фракционирования для выделения высокооктанового бензина, может производить изменения технологических характеристик процесса и отслеживать возможные результаты и последствия на модели, что уменьшает риски возникновения неконтролируемых опасных и чрезвычайных ситуаций на производстве, и, как следствие, травмирования работников и аварий.

В данном случае, с позиции социальной ответственности, применяя разработанную модель, магистрант только может уменьшить риск возникновения человеческого фактора при недолжном ведении технологического режима. Разработанная модель применима в строго определенных условиях. В модели необходимо учесть, что между операциями внесения исходных данных и осуществлением конкретных операций, оператору требуется время.

Целью раздела являются анализ опасных и вредных факторов, имеющих место на объекте при неправильном изменении технологических характеристик процесса, а также мероприятий по ограничению их воздействия на персонал, создание безопасных условий труда для рабочих, перечисление организационных и технических мер, предусмотренных для чрезвычайных ситуаций, а также изучение вопроса охраны окружающей среды.

6. 1 Анализ выявленных вредных факторов производственной проектируемой среды

Согласно [53], выделяют вредные и опасные факторы производственной среды и трудового процесса. К наиболее вредным производственным факторам относят высокую и низкую температуру воздуха рабочей зоны, повышенный уровень шума и вибрации на рабочем месте, недостаточную освещенность рабочих зон, взрывы, пожары и др. Все эти факторы могут возникнуть при обслуживании объектов нефтегазоперерабатывающего комплекса.

6. 1. 1 Характеристика используемых веществ

Приступая к работе с химическими веществами, следует учитывать физические свойства, а также характер воздействия их на человека. Безопасные условия труда обеспечиваются комплексом профилактических мероприятий, способствующих созданию таких условий труда, когда суммарное воздействие

всех факторов на организм человека не превышает установленных предельно – допустимых концентрации [36].

Цеолит, используемый в качестве катализатора при работе установки реакторного блока, по степени воздействия на организм человека относится к веществам третьего класса опасности, т.е. к умеренно опасным веществам [37].

Бензин (нефтяной, малосернистый), являющийся основным продуктом процесса, относится к малоопасным веществам, согласно [38]. В таблице 36 приведены классы опасностей и предельно допустимые концентрации (ПДК) используемых веществ в атмосферном воздухе населенных мест.

Таблица 36 – Класс опасности и ПДК веществ, используемых в работе

Вещество	Предельно допустимая концентрация, мг/м ³		Класс опасности	Влияние на организм человека
	Максимальная разовая	Среднесуточная		
Цеолиты (природные и искусственные)	–	0,03	3	Аэрозоли и пыли, находящиеся в воздухе, оказывают негативное воздействие на органы дыхания, слизистую оболочку глаз и кожный покров. Пыль при контакте с кожей, забивает сальные железы, не дает коже дышать, а при попадании в организм человека ингаляционным путем, оседает в легких. Постоянное воздействие этих факторов приводит к развитию профессиональных заболеваний.
Бензин (нефтяной, малосернистый)	5	1,5	4	Пары бензина токсичны; оказывают влияние на центральную нервную систему, деятельность эндокринных желез, вызывают острые и хронические отравления; при контакте с кожей вызывают некроз тканей, гнойничковые заболевания кожи и подкожной клетчатки, а также экземы и пигментные дерматиты.

Для предотвращения распространения и влияния опасных и вредных веществ на организм человека, применяемых на производстве, уделяют особое

внимание к средствам коллективной защиты. Одним из наиболее распространенных средств является выполнение герметичных соединений всех трубопроводов и аппаратов.

Для предотвращения возникновения хронических отравлений большое значение имеет правильное питание. Согласно [39], работникам выделяют 0,5 л. молока на один рабочий день. А в соответствии с [40] регламентирована бесплатная норма выдачи смывающих и (или) обезвреживающих средств сотрудникам, работающим с нефтью и нефтепродуктами, один раз в месяц таких как:

1. 100 мл защитных средств гидрофильного действия (впитывающие влагу, увлажняющие кожу);
2. Очищающие средства: 300г твердого туалетного мыла или 500 мл жидких моющих средств.

Также сотрудники, задействованные в выполнении работ, которые связаны с контактом с бензиновыми фракциями и другими веществами нефтяного происхождения, проходят предварительный и периодический медицинские осмотры раз в год. Перечень необходимых врачей также представлен в [50].

6. 1. 2 Микроклимат

Показателями микроклиматических условий производственной среды согласно [41] являются температура, относительная влажность и скорость движения воздуха. Негативные значения показателей микроклимата становятся причиной уменьшения производственных показателей в работе, простуды, радикулита, хронического бронхита и многих других заболеваний. Для работы в условиях промышленного производства установлены следующие санитарные нормы, согласно [41]:

- Температура воздуха для холодного и переходного периодов года составляет 16 – 22°C, для тёплого периода 18 – 25°C;

- Влажность воздуха не превышает 30 – 60 %;
- Скорость движения воздуха 0,2 – 0,5 м/с.

К средствам коллективной защиты в помещениях производственных площадок относят автоматическое кондиционирование воздуха рабочей зоны для поддержания заданных значений микроклиматических показателей. К индивидуальным средствам защиты выделяют проветривание помещения на рабочем месте. В случае необходимости защиты работника от низких и высоких температур воздуха, применяют специальную одежду, обувь, средства защиты рук и головы [51].

6. 1. 3 Освещенность

Производственное освещение является неотъемлемым элементом при трудовой деятельности человека. Правильная организация освещения на рабочем месте обеспечивает сохранность зрения работника и нормальное состояние его нервной системы, а также обеспечивает безопасность в процессе производства.

Искусственное освещение применяется там, где недостаточно потока естественного освещения или оно отсутствует в темное время суток. За счет рационального освещения помещений и рабочих мест обеспечивается снижение утомляемости работающих и повышается производительность труда. Нормы естественного освещения сводятся к нормированию коэффициента естественного освещения, и определяется санитарными нормами и правилами [55].

Согласно [55], на производстве где осуществляется постоянное наблюдение за ходом производственного процесса, освещенность при системе общего освещения составляет 200 лк, коэффициент естественного освещения при верхнем или комбинированном освещении равен 3%.

В темное время суток подлежат освещению следующие участки производственных площадок: все рабочие места, объекты технологической

схемы, подходы к ним, проходы и переходы. Искусственное освещение выполняется в соответствии с установленными нормативами, и обеспечивает установленный санитарными нормами уровень освещения.

6. 1. 4 Производственный шум

Производственные процессы сопровождаются значительным шумом и вибрацией. Длительное воздействие шума вызывает утомляемость и раздражительность, ухудшает слух, реже приводит к глухоте, также уменьшается внимание, острота зрения и увеличивается расход энергии человека, при выполнении какого – либо вида работ. Все эти факторы в совокупности приводят к снижению производительности труда и становятся причиной травматизма на производстве.

Для оценки действия шума на человека введено понятие уровня шума, измеренного в децибелах (дБ). Допустимые шумовые характеристики рабочих мест регламентируются [42]. В соответствии с требованиями [42], в производственных помещениях допускается уровень шума до 80 дБ.

6. 1. 5 Производственная вибрация

Вибрация воспринимается организмом человека как сотрясения. Также вибрация очень часто сопровождается слышимым шумом. Вибрация имеет прямое воздействие на:

1. центральную нервную систему;
2. желудочно – кишечный тракт;
3. вестибулярный аппарат.

Вибрация вызывает головокружение, онемение конечностей, заболевание суставов. Более того, наступает повышенная утомляемость и раздражительность. Также к снижению производительности труда (примерно на 10 – 15%) и увеличению риска травматизма ведут следующие факторы:

ухудшение сна, головные боли, рассеянность внимания и уменьшение остроты зрения.

Кроме вредного воздействия на организм человека, вибрации оказывают негативное воздействие и на производственное оборудование, коммуникации и сооружения. Гигиенические допустимые уровни вибрации регламентирует [43].

В производственных условиях с целью предотвращения вредного воздействия шума и вибрации на организм человека добиваются, чтобы уровни шума и вибрации не превышали допустимых значений. Основные методы снижения шума и вибрации, согласно [44]:

- устранить причины шума и вибрации или существенно их ослабить в источнике образования;
- изолировать источники шума и вибрации от окружающей среды средствами звуко– и виброизоляции, звуко– и вибропоглощения;
- применять средства, снижающие шум и вибрацию на пути их распространения;
- уменьшить плотность звуковой энергии помещений, отражений от стен, перекрытий (акустическая обработка);
- архитектурно – планировочные решения с рациональным размещением технологического оборудования, машин, механизмов;
- применять средства индивидуальной защиты (бируши, наушники, шлемофоны и тд).

6. 2 Анализ опасных факторов производственной среды

6. 2. 1 Механические опасности

Как правило, травмы, полученные механическим путем, не являются случайными. Это связано, в первую очередь, с несоблюдением техники безопасности при эксплуатации и обслуживании различной техники и предметов, которые не были вовремя устранены.

Источников механической опасности на производстве огромное количество. Например, движущим механизмом для перемещения перерабатываемой среды являются насос, открытые движущиеся части которого травмируют работников при несоблюдении правил техники безопасности.

Также установки характеризуются огромными размерами, их обслуживание и ремонт в связи с этим является затруднительным и травмоопасным (ремонт на большой высоте и т.д.). В ходе неправильной эксплуатации установок случаются взрывы или пожары. В связи с этим, работники подвержены воздействию от осколков, обломков или ударной волны. Наличие в системе высокого давления и высокой температуры также служит причиной для травм.

Для того чтобы защитить себя от травм на производстве, работники строго соблюдают все технические регламенты по эксплуатации оборудования, систему планово – предупредительного ремонта (ППР) и правила поведения на производственной площадке.

Во время нахождения в опасной зоне работники используют средства индивидуальной защиты [54]. К средствам коллективной защиты для предотвращения механического травмирования относят ограждения и блокировочные устройства.

6. 2. 2 Электробезопасность

Для протекания непрерывного технологического процесса его обеспечивают безопасным электрическим оборудованием, а также создают благоприятные условия труда для человека, связанного с электричеством [36]. При нарушении технического регламента по эксплуатации или неисправности электрооборудования возникает опасность воздействия электрического тока на человека.

Электробезопасность обеспечивается в соответствии с [45] и относится к особо опасной категории. К основным техническим средствам защиты от действия электрического тока на производственных площадках относят: изоляцию токопроводящих частей и их контроль, установки оградительных устройств, предупредительная сигнализация и блокировка, применение предупреждающих плакатов, защитное заземление, зануление и отключение.

Преднамеренное соединение с землей металлических нетоковедущих частей, которые оказываются под напряжением, называют защитным заземлением [49]. Это заземление удовлетворяет ряду требований, изложенных в [49], чтобы защитить человека от поражения электрическим током.

Т.к. все основное оборудование производства находится на открытой площадке, необходимо применять средства защиты от воздействия молний на технологическое оборудование, действие которых являются причинами возникновения пожаров и взрывов на производстве [58]. К комплексу средств молниезащиты зданий и сооружений относят устройства защиты от прямых ударов молний (внешняя молниезащита) и устройств защиты от вторичных воздействий молний (внутренняя молниезащита).

Особое внимание уделяют защите от статического электричества. Для его снижения применяют специальное покрытие полов, которое выполнено из линолеума антистатического поливинилхлоридного, а рабочие места снабжаются резиновыми ковриками.

6. 2. 3 Термические опасности

Источниками термической опасности на данном производстве являются теплообменное оборудование, а также реактор, в котором проходит реакция. К тому же, установка эксплуатируется при повышенной температуре 360 – 460°С. Нарушение герметичности оборудования, приводит к получению ожогов. Для того чтобы избежать термических повреждений, работник соблюдает технический регламента по эксплуатации оборудования. А также применяют

для установок различные теплоизоляционные материалы, которые удовлетворяют требованиям охраны труда (являются взрывобезопасными), например, минеральную вату, керамзит, пензу и тд. Более того, применяют различные теплоотражающие, теплопоглощающие и тп. экраны.

6. 2. 4 Пожаровзрывобезопасность

Пожарная профилактика на любом производстве заключается в представлении комплекса организационных и технических мероприятий, которые направлены на обеспечение безопасности, на предотвращение пожара, ограничения его распространения, а также создания условий для успешного тушения пожара.

Пожары и взрывы на нефтегазовых предприятиях представляют серьезную угрозу для людей, а также причиняют огромный материальный ущерб. Поэтому обеспечение пожарной и взрывной безопасности на производственных площадках имеет государственное значение. По [46] к опасным факторам пожара, воздействующим на людей и имущество, относятся:

- 1) пламя и искры;
- 2) тепловой поток;
- 3) повышенная температура окружающей среды;
- 4) повышенная концентрация токсичных продуктов горения и термического разложения;
- 5) пониженная концентрация кислорода;
- 6) снижение видимости в дыму.

Среди организационных и технических мероприятий, осуществляемых для устранения возможности пожара, выделяют следующие меры [46]:

- использование только исправного оборудования;
- проведение периодических инструктажей по пожарной безопасности;
- назначение ответственного за пожарную безопасность помещения;

- отключение электрооборудования, освещения и электропитания по окончании работ;
- курение в строго отведенном месте;
- содержание путей и проходов для эвакуации людей в свободном состоянии.

Для предотвращения образования взрывоопасных концентраций продуктов в помещениях и других закрытых местах на нефтегазоперерабатывающих предприятиях осуществляют герметизацию оборудования и всех путей передвижения нефти и газа, устраивают эффективную вентиляцию в помещениях, а также проводят мероприятия по предотвращению появления огня во взрывоопасных местах.

Пожар можно ликвидировать механическим воздействием на пламя, изоляцией его от воздуха, охлаждением или удалением горючих веществ из очага горения. Для этой цели используют огнегасительные вещества и противопожарное оборудование: водяные гидранты, шланги, стволы, пеногенераторы, пенокамеры, пенозакидные мачты и др [36].

Тушение пожара в основном происходит с применением огнегасительных веществ. Наиболее распространенным огнегасительным веществом по [51] является вода в виде струй, пара или в распылённом состоянии, также применяют твердые вещества или сухие огнетушащие порошки (песок, кошма), инертные газы (азот, двуокись углерода), галоидопроизводные огнегасительные составы, пены (химическая и воздушно – механическая).

6. 3 Охрана окружающей среды

Охрана окружающей среды – это комплексная проблема и наиболее активная форма ее решения – это сокращение вредных выбросов промышленных предприятий через полный переход к безотходным или малоотходным технологиям производства [36].

Предприятия, которые являются источником негативного воздействия на среду обитания и здоровье человека, отделяют от жилой застройки санитарно – защитными зонами (СЗЗ) по [55]. Также по [55], предприятия по производству и переработке нефти, попутного и природного газа относят к первому классу, и СЗЗ должна быть не менее 1000 м. СЗЗ для первого класса должна быть озеленена не менее чем на 40% с организацией полосы древесно – кустарниковых насаждений со стороны жилой зоны. На рисунке 41 представлено предполагаемое схематичное изображение организации СЗЗ для НПЗ. В СЗЗ не допускается размещение объектов для проживания людей, спортивных сооружений, детских учреждений и тд.

Атмосферный воздух, который окружает человека вне зависимости от места его пребывания, непрерывно подвергается загрязнению. К основным выбросам, загрязняющим атмосферный воздух, относят выбросы от вентиляционных и технологических установок (выбросы УВ).

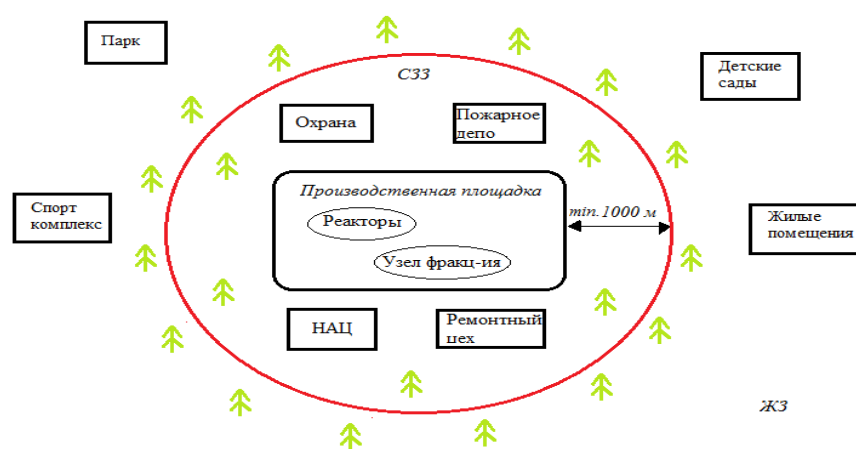


Рисунок 41 – Схема СЗЗ для НПЗ

В производственных помещениях воздух подвержен загрязнению выбросами технологического оборудования. Средства защиты атмосферного воздуха сводят к минимуму присутствие вредных веществ в воздухе среды обитания человека не выше ПДК. В тех случаях, когда реальные выбросы выше уровня ПДК, на производственных площадках создаются и используются аппараты для очистки газов от нежелательных веществ. Среднесуточная ПДК

бензина и цеолитов (катализатора) в воздухе населенных пунктов не превышает 1,5 и 2 мг/м³ соответственно [38].

Что касается сбросов в гидросферу, то для предприятия характерны сбросы воды от санитарно – бытовых и ремонтных работ при проведении гидравлических испытаний аппаратов. Для бензинсодержащих веществ нефтяного происхождения по [52] ПДК не превышает 0,1 мг/м³. Твердые отходы производства образуются в ходе выхода из строя деталей и узлов аппаратов, которые необходимо утилизировать, также отработанный катализатор, не подлежащий регенерации, и катализаторная пыль.

6. 4 Защита в чрезвычайных ситуациях (ЧС)

Мероприятия, проводимые во время ЧС (аварий, стихийных бедствий, военных конфликтов), представляют собой проведение спасательных работ и неотложных аварийно – восстановительных работ в очаге поражения. Данные мероприятия проводятся на основании положения комплекса государственных стандартов по предупреждению и ликвидации ЧС и определены в [47].

ЧС возникают на производстве в результате следующих нарушений: прекращение подачи сырья; прекращение подачи электроэнергии; нарушение герметичности соединений трубопроводов, аппаратов или их разрыв; неисправность средств контроля и автоматики. Наиболее распространенные ЧС – это пожары и взрывы. Спасательные и другие неотложные работы в очагах поражения пожарной дружиной, состоящей из работников предприятия, включают [36]:

- разведку очага поражения, в результате которой получают истинные данные о сложившейся обстановке, определяют объемы работ, уточняют способы ведения спасательных и аварийных работ, разрабатывают план ликвидации последствий ЧС;
- поиск и освобождение из – под завалов пострадавших; эвакуацию людей из опасных зон и оказание им первой медицинской помощи;

- локализацию и тушение пожара;
- санитарную обработку людей, обеззараживание транспорта, технических систем, зданий, сооружений и промышленных объектов;
- неотложные аварийно – восстановительные работы на промышленных объектах.

Для исключения возможности несчастных случаев проводятся обучения и проверка знаний работников требованиям безопасности труда.

6. 5 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности

В соответствии с [48], каждый человек обладает правом на труд в таких условиях, которые отвечают требованиям безопасности и гигиены, и также правом на охрану здоровья. А в соответствии с [35], один из национальных приоритетов в сохранении человеческого капитала в процессе трудовой деятельности – это обеспечение безопасности жизни и здоровья работников. Этот приоритет рассматривается в неразрывной связи с решением задач по улучшению условий и охраны труда, промышленной и экологической безопасности.

По [53] условия труда на рабочем месте оператора на НПЗ относят к вредным условиям труда, подклассу 3.3, т.е. воздействие вредных и опасных производственных факторов приводят к появлению и развитию профессиональных заболеваний легкой и средней степени тяжести в период трудовой деятельности. После принятия [56], и в последствие с изменением [57], для работников, условия труда которых по результатам социальной оценки отнесены к подклассу 3.3, устанавливают сокращенную продолжительность рабочего времени не более 36 часов в неделю. Также предоставляется ежегодный дополнительный оплачиваемый отпуск, минимальная продолжительность которого устанавливается в размере 7 дней, и минимальный размер повышения оплаты труда в размере 4% от тарифной ставки или оклада.

Заключение

Все более ужесточающиеся требования к качеству товарного бензина, вызывают необходимость оптимизировать различные процессы нефтепереработки. Для малотоннажных производств высокооктановых бензинов и их компонентов перспективна безводородная технология облагораживания бензиновых фракций на цеолитсодержащих катализаторах, благодаря одностадийности процесса и низкой чувствительности катализатора к сере.

Следует отметить, что в рамках проведенного НИ, удалось достичь поставленной цели, а именно – рассчитать и оптимизировать процесс получения высокооктановых бензинов с применением программного продукта HYSYS Aspen Tech.

На основании термодинамических закономерностей представилась возможность оценить направление протекания реакций предложенной схемы превращения УВ на ЦСК и сделать вывод о том, что в условиях цеоформинга возможно большое количество реакций, но для получения определенного состава бензина, необходимо подобрать кинетические параметры процесса таким образом, чтобы интенсифицировать целевые и подавить побочные реакции.

Разработаны математические модели реакторного блока и блока выделения товарных продуктов, проведена их оптимизация в среде HYSYS Aspen Tech. Предложена целевая функция, позволяющая определить оптимальные условия при работе на максимальный выход или максимальное ОЧ продукта. Более того, найдены оптимальные режимы работы реактора и блока фракционирования для различных температур конверсии.

Также в работе была рассмотрена экономическая эффективность исследования с позиции финансовой и ресурсной эффективности и меры обеспечения безопасности при использовании разработанной модели на производстве.

Список публикаций студента

1. Машина В. В. Расчет эксплуатационных свойств моторных топлив // Химия и химическая технология в XXI веке: материалы XIV Всероссийской научно – практической конференции имени профессора Л.П. Кулёва студентов и молодых ученых с международным участием: в 2 т., Томск, 13 – 16 Мая 2013. – Томск: ТПУ, 2013 – Т. 2 – С. 46 – 48.
2. Самборская М. А. , Лактионова Е. А. , Вольф А. В. , Машина В. В. Учет дезактивации катализатора при оптимизации фракционирования продуктов облагораживания бензинов // Известия вузов. Химия и химическая технология. – 2014 – Т. 57 – №. 11. – С. 95 – 98.
3. Mashina V. V. Problems of commercial gasoline production during the process of zeoforming // Язык и мировая культура: взгляд молодых исследователей: сборник научных трудов XIV Всероссийской научно – практической конференции: в 2 частях , Томск, 25 – 28 Апреля 2014. – Томск: Изд-во ТПУ, 2014 – Т. 2 – С. 98 – 101.
4. Samborskaya M. A. , Laktionova E. A. , Volf A. V. , Mashina V. V. , Syskina A. A. Optimal fractionation of products of refining straight – run gasoline on zeolite catalyst with account of its deactivation // Procedia Chemistry. – 2014 – Vol. 10. – p. 332 – 336.
5. Машина В. В. , Самборская М. А. Моделирование оптимального режима получения товарного продукта процесса цеоформинга // Химия и химическая технология в XXI веке: материалы XV Международной научно – практической конференции студентов и молодых ученых имени профессора Л.П. Кулёва: в 2 т., Томск, 26 – 29 Мая 2014. – Томск: ТПУ, 2014 – Т. 2 – С. 69 – 71.
6. Машина В. В. Моделирование оптимального режима получения товарного продукта процесса цеоформинга // Проблемы геологии и освоения недр: Труды XVIII Международного симпозиума имени академика М.А. Усова студентов и молодых ученых, посвященного 115 – летию со дня рождения

академика Академии наук СССР, профессора К.И. Сатпаева, 120 – летию со дня рождения члена – корреспондента Академии наук СССР, профессора Ф.Н. Шахова, Томск, 7 – 11 Апреля 2014. – Томск: Изд-во ТПУ, 2014 – Т. 2 – С. 224 – 226.

7. Mashina V. V. , Samborskaya M. A. Optimal code modeling for extraction of zeoforming commercial product // Химия и химическая технология в XXI веке: материалы XV Международной научно – практической конференции студентов и молодых ученых имени профессора Л.П. Кулёва: в 2 т., Томск, 26 – 29 Мая 2014. – Томск: ТПУ, 2014 – Т. 2 – С. 229 – 231.

8. Машина В. В. , Чередниченко О. А. Разработка модели реактора цеоформинга // Химия и химическая технология в XXI веке: материалы XVI Международной научно – практической конференции студентов и молодых ученых, посвященной 115 – летию со дня рождения профессора Л.П. Кулёва: в 2 т., Томск, 25 – 29 Мая 2015. – Томск: ТПУ, 2015 – Т. 2 – С. 99 – 101.

9. Mashina V. V., Cherednichenko O. A. Mathematical modeling of hydrocarbons conversion kinetics on zeolite catalysts // Химия и химическая технология в XXI веке: материалы XVI Международной научно – практической конференции студентов и молодых ученых, посвященной 115 – летию со дня рождения профессора Л.П. Кулёва: в 2 т., Томск, 25 – 29 Мая 2015. – Томск: ТПУ, 2015 – Т. 2 – С. 207 – 209.

10. Samborskaya M. A. , Mashina V. V. , Cherednichenko O. A. , Makarovskikh A. V. Modeling of reactor of straight – run gasoline fractions refining on zeolite catalysts // Procedia Chemistry. – 2015 – Vol. 15. – p. 237 – 244.

11. Gryaznova I.A., Samborskaya M.A., Romanenkova V.V., Volf A.V. Optimization of reactor of hydrocarbons refining on zeolite catalysts // Catalytic hydroprocessing in oil refining. II Scientific – Technological Symposium (STS – II) [Electronic recourse]. – 2016. – p. 169 – 170.

Список литературы

1. Eva KINT. Ab initio modelling of acid catalyzed hydrocarbon conversion processes. *Academiejaar*. 2005 – 2006. p.115.
2. Samborskaya M.A., Mashina V.V., Cherednichenko O.A., Makarovskikh A.V. Modeling of reactor of straight-run gasoline fractions refining on zeolite catalysts // *Procedia Chemistry*. 2015; Vol. 15: p. 237 – 244.
3. Stepanov V.G., Ione K.G. Zeoforming – a promising process for production of unleaded gasolines // *Chemistry and Technology of Fuels and Oils*. 2000; Vol.36: №1. p.1 – 7 (in Russia).
4. Primo A., Garcia H.; *Chem. Soc. Rev.* 2014; Vol. 43: p. 7548 – 7561.
5. Kae Shin Wong. Benzene alkylation with ethane into ethylbenzene over Pt-containing zeolite bifunctional catalysts. A thesis submitted for the degree of Doctor of Philosophy. – University of Bath Department of Chemical Engineering. 2009; – P.281.
6. Subramanya Venkatesh Nayak. Zeolites for Cleaner Processes: Alkylation of isobutane and n – butene. Dissertation. – Washington university. 2009; – P.201.
7. Guisnet, M., Gnep, N. S. Aromatization of short chain alkanes on zeolite catalysts. *Applied Catalysis A: General* 89. 1992; p. 1 – 30.
8. Haag, W. O., Dessau, R. M. Duality of mechanism for acid – catalysed paraffin cracking. In: *Proceedings of the Eighth International Congress on Catalysis*. 1984; Vol. 2: p. 305 – 316.
9. Nguyen, L. H., Vazhnova, T., Kolaczowski, S. T., Lukyanov, D. B. Combined experimental and kinetic modelling studies of the pathways of propane and n – butane aromatization over H – ZSM – 5 catalyst. *Chemical Engineering Science* 61. 2006; p. 5881 – 5894.
10. Stepanov V. G., Snytnikova G. P., Ione K. G.; *Chem. and Tech. of Fuels and Oils*. 1992; Vol. 3: p. 27 – 29 (In Russian).
11. Stepanov V. G., Mastikhin V. M., Ione K. G.; *Ser. Khim.* 1982; Vol. 3: p. 619 – 625 (In Russian).

12. Boreskov G.K.; *Gas Industry*. 1985; p. 43 – 50 (In Russian).
13. Snytnikova G.P., Stepanov V.G., Dudarev S.V.; *Synthesis and Study of Catalysts*. 1988; p. 123 – 129 (In Russian).
14. Kemball C. *Chem. Soc. Rev.* 1984; Vol. 13: p. 375 – 392.
15. Botavina M. A., Nekrasov N. V., Kiperman S. L.; The Kinetics of Hydrocarbon Conversion on ZSM – 5 Zeolites. *Kinetics and Catalysis*. 2000; Vol. 41; 5: p. 679 – 687.
16. Siffert S., Garin F.; 2 – methylpentane catalytic reactions on Pt (3%wt) – HNaß – zeolite. Kinetic studies. *J. Chim. Phys.* 1998; Vol. 95: p. 536 – 580.
17. Aditya Bhan; Selective Catalytic Synthesis of Branched C₄–C₇ Hydrocarbons by Low Temperature C₁ Homologation Reactions over Medium and Large Pore Acidic Zeolites: A Mechanistic Study PhD.
18. Johannes A Lercher, Kulathuier Seshan. Sorption and activation of hydrocarbons by molecular sieves / Solid catalysts and porous solids. 2005; Vol.2: p. 57 – 62.
19. Xiaobo Zheng; A computational investigation of hydrocarbon cracking: gas phase heterogeneous catalytic reactions on zeolites PhD. 2006; p. 59 – 83 .
20. Konno H., Okamura T., Kawahara T., Nakasaka Y., Tago T., Masuda T., Kinetics of n – Hexane Cracking over ZSM – 5 Zeolites Effect of Crystal Size on Effectiveness Factor and Catalyst Lifetime. *Chem. Eng. J.* 2012; doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.cej.2012.06.157>.
21. Rovenskaya S. A., Ostrovskii N. M.; *Theoretical Foundations of Chem. Engineering*. 2008; Vol. 42: p. 643 – 649 (In Russian).
22. Lalji Dixit, T. S. R. Prasada Rao; *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 1999; Vol. 39: p.218 – 223.
23. Velichkina L.M. Hydrogen – Free Domestic Technologies for Conversion of Low – Octane Gasoline Distillates on Zeolite Catalysts // *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*, 2009; Vol. 43; No. 4: p. 486–493 (in Russia).
24. Степанов В.Г., Ионе К.Г. Производство моторных топлив из прямогонных фракций нефти и газовых конденсатов с применением процесса

“Цеоформинг” // Химия в интересах устойчивого развития. – 2005. – №6. – С.809 – 822.

25. Установка каталитического получения высокооктановых бензиновых фракций и ароматических углеводородов: патент Рос. Федерации № 2098173; заявл. 09.04.96; опубл. 10.12.97: [Электронный ресурс] / freepatent. – Режим доступа: <http://www.freepatent.ru/patents/2098173>.

26. Эрих В.Н., Расина М.Г., Рудин М.Г. Химия и технология нефти и газа, 2-ое изд. – Л.: изд – во Химия, 1977, С. 256 – 259.

27. Суханов В.П. Переработка нефти: Учебник для средних проф. – техн. учебн. заведений. – 2-ое изд. – М.: Высш.школа, 1979. – С.183 – 185.

28. Владимиров А.И. Установки каталитического риформинга. – М.: Нефть и газ, 1993, С. 47 – 54.

29. Fixed – bed reactor / Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry. 1992. Vol B4. P.199 – 214.

30. Хорошко С.И., Хорошко А.Н. Сборник задач по химии и технологии нефти и газа. Учеб. пособие для спец. учеб. заведений. – Мн.: Выш. шк., 1989. – С. 25.

31. Лашинский А.А., Толчинский А.Р. Основы конструирования и расчета химической аппаратуры: Справочник – 3 – е изд., стереотипное. – М.: ООО ИД “Альянс”, 2008. – 752 с.

32. Основные процессы и аппараты химической технологии: Пособие по проектированию / Под ред. Ю.И. Дытнерского. – М.: Химия, 1983. – 272 с.

33. ГОСТ 51866 – 2002. Топлива моторные. Бензин неэтилированный. Технические условия. – М. – Стандартинформ, 2009. – 29 с.

34. Технический регламент “О требованиях к автомобильному и авиационному бензину, дизельному и судовому топливу, топливу для реактивных двигателей и топочному мазуту” от 27 февраля 2008 г. [Текст] Постановление Российской Федерации №118.

35. Генеральное соглашение между общероссийскими объединениями профсоюзов, общероссийскими объединениями работодателей и Правительством Российской Федерации на 2014 – 2016 годы.

36. Охрана труда в нефтехимической промышленности: конспект лекций / О. Ю. Воронков, И. В. Ревина. – Омск: Изд-во ОмГТУ, 2009. – 80 с.

37. Дополнение № 7 к ГН 2.2.5.1313 – 03 “Предельно допустимые концентрации (ПДК) вредных веществ в воздухе рабочей зоны”.

38. ГН 2.1.6.1338 – 03. “Предельно допустимые концентрации (ПДК) загрязняющих веществ в атмосферном воздухе населенных мест” [Текст]: Постановление Главного государственного санитарного врача РФ от 17.06.2014 г. № N 37 // Российская газета. – 14.07.2014. – № 6427. – Режим доступа: [Консультант плюс].

39. Приказ Министерства здравоохранения и социального развития РФ от 16 февраля 2009 г. N 45н “Об утверждении норм и условий бесплатной выдачи работникам, занятым на работах с вредными условиями труда, молока или других равноценных пищевых продуктов. Порядка осуществления компенсационной выплаты в размере, эквивалентном стоимости молока или других равноценных пищевых продуктов, и перечня вредных производственных факторов, при воздействии которых в профилактических целях рекомендуется употребление молока или других равноценных пищевых продуктов” // Российская газета. – 22.05.2009. – № 92. – Режим доступа: [Консультант плюс].

40. Приказ Министерства здравоохранения и социального развития РФ от 17 декабря 2010 г. №1122н “Об утверждении типовых норм бесплатной выдачи работникам смывающих и (или) обезвреживающих средств и стандарта безопасности труда “Обеспечение работников смывающими и (или) обезвреживающими средствами”” // Российская газета. – 20.05.2011. – № 107. – Режим доступа: [Консультант плюс].

41. ГОСТ 12.1.005 – 89. Общие санитарно – гигиенические требования к воздуху рабочей зоны. Поправка к ГОСТ 12.1.005 – 88 от 01.04.2004 [Текст]. – Взамен ГОСТ 12.1.005 – 76. – М: Стандартиформ, 2008. – 50 с.

42. Строительные нормы и правила СНиП 23 – 03 – 2003. Защита от шума. [Текст]. – М: Стандартиформ, 2004. – 25 с.

43. ГОСТ 12.1.012 – 2004. Система стандартов безопасности труда. Вибрационная безопасность. Общие требования. Поправка от 01.07.2009 [Текст]. – М: Стандартиформ, 2010. – 23 с.

44. ГОСТ 12.1.029 – 80. Средства и методы защиты от шума. Классификация. [Текст]. – М: Стандартиформ, 1998. – 3 с.

45. Приказ Минтруда РФ от 24.07.13 № 328н “Правила по охране труда при эксплуатации электроустановок” // Бюллетень нормативных актов федеральных органов исполнительной власти – 03.05.2014. – №5. Режим доступа: [Консультант плюс].

46. Технический регламент о требованиях пожарной безопасности [Текст]: Федеральный закон от 22 июля 2008 г. №123–ФЗ // Собрании законодательства Российской Федерации. – 2008. – №30. – Ст. 3579.

47. ГОСТ Р 55059 – 2012. Безопасность в чрезвычайных ситуациях. Менеджмент риска чрезвычайной ситуации. Термины и определения [Текст]. – Москва: Стандартиформ, 2014 – 8 с.

48. Конституция Российской Федерации. [Электронный ресурс]: [(принята всенародным голосованием 12.12.1993) (с учетом поправок, внесенных ФЗ о поправках к Конституции РФ от 30.12.2008 N 6–ФЗ, от 30.12.2008 N 7–ФЗ)]. //Российская газета. – 21.01.2009. – № 7. – Режим доступа: [Консультант плюс].

50. Приказ от 12 апреля 2011 г. N 302н “Об утверждении перечней вредных и (или) опасных производственных факторов и работ, при выполнении которых проводятся предварительные и периодические медицинские осмотры (обследования) и порядка проведения обязательных предварительных и периодических медицинских осмотров (обследований) работников, занятых на

тяжелых работах и на работах с вредными и (или) опасными условиями труда”
// Российская газета. Режим доступа: [Консультант плюс].

51. Крепша Н.В., Свиридов Ю.Ф. Безопасность жизнедеятельности: Учеб.– метод. пособие. – Томск: Изд–во ТПУ, 2003. – 144 с.

52. ГН 2.1.5.2280 – 07. Предельно – допустимые концентрации (ПДК) химических веществ в воде водных объектов хозяйственно – питьевого и культурно – бытового водопользования. Дополнение и изменения №1 к ГН 2.1.5.1315 – 03. – Режим доступа: [Консультант плюс].

53. Федеральный закон Российской Федерации от 28 декабря 2013 г. N 426 – ФЗ “О специальной оценке условий труда” Дата публикации: 30.12.2013.

54. Постановление Правительства Российской Федерации от 24 декабря 2009 г. N 1213 “О безопасности средств индивидуальной защиты”.

55. Постановление Российской Федерации от 10 апреля 2003 г. № 38 “О введении в действие СанПин 2.2.1 / 2.1.1.1200 – 03 “Санитарно – защитные зоны и санитарная классификация предприятий, сооружений и иных объектов””.

56. Федеральный закон № 421 о внесении изменений в отдельные законодательные акты РФ в связи с принятием Федерального закона "О специальной оценке условий труда" от 28 декабря 2013 г.

57. Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2002 №197 – ФЗ [Электронный ресурс] [(принят Государственной Думой 21.12.2001)]. – Режим доступа: [Консультант плюс].

58. СО 153 – 34.21.122 – 2003. Инструкция по устройству молниезащиты зданий, сооружений и промышленных коммуникаций [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://www.sonel.ru/ru/biblio/standards/so_153-34.21.122-2003/ – свободный. Загл. с экрана.

59. Машина В. В., Самборская М. А. Моделирование оптимального режима получения товарного продукта процесса цеоформинга // Химия и химическая технология в XXI веке: материалы XV Международной научно – практической конференции студентов и молодых ученых имени профессора

Л.П. Кулёва: в 2 т., Томск, 26 – 29 Мая 2014. – Томск: ТПУ, 2014 – Т. 2 – С. 69 – 71.

60. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение: учебно – методическое пособие / Н.А. Гаврикова, Л.Р.Тухватулина, И.Г. Видяев, Г.Н. Серикова, Н.В. Шаповалова; Томский политехнический университет. – Томск: Изд- во Томского политехнического университет, 2014. – 73 с.

Appendix A
(recommended)
Literature review

Introduction

The relevance of zeolite catalysts usage for gasoline refining

Hydrocarbon conversion processes such as catalytic cracking of hydrocarbons, isomerization of olefins, alkylation of aromatic compounds, etc. play an important role in the petrochemical industry. Due to the continually increasing competition in these industrial sectors, the ever raising quality requirements and the need for more environmentally friendly processes, there is a permanent incentive to understand and improve processes [1].

Since the traditional used homogeneous catalysts are extremely corrosive and harmful for the environment, there is an increasing demand for environment friendly heterogeneous catalysts. The efficiency of oil refining is largely based on the use of zeolites as catalysts. The use of zeolites as catalysts in refining and petrochemistry was considered as one of the major accomplishments of the XXth century.

Using zeolites as catalysts can moreover increase the yield of the required products and thus reduce the production costs significantly. In addition, zeolites present the advantages, in comparison with previously used alumina – based catalysts, of having a better long – term thermal and mechanical stability as well as a higher selectivity.

Zeolites are widely used as catalysts and catalyst supports for fuel and lubricants production processes with enhanced performance properties [2]. This catalyst is characterized by the elevated stability of the catalytic action, which allows conducting the process with technology utilizing a stationary bed of catalyst [3].

The following advantages make the conversion processes on zeolite catalysts cost – effective and attractive for implementing:

- Low operating costs and capital investments;
- Simplicity of the technology;

- Low explosive and fire hazards due to the lack of hydrogen;
- Low sensitivity of a catalyst to the quality of raw materials.

Thus, all of the zeolite catalysts advantages, which are mentioned above, enable to develop the new high effective processes, which can displace the expensive platinum based catalysts processes and technology with hydrogen.

The process of Zeoforming is a technology of the zeolite – catalyzed manufacturing of high – octane gasolines. It was developed by the SEC Zeosit of the Boreskov Institute of Catalysis, Siberian Branch, Russian Academy of Sciences (BIC SB RAS), Novosibirsk.

The verification of the process was performed in 1982 – 1990 using pilot equipment. The process was accepted in industry both in Russia and abroad.

The first pilot plant based on the process of Zeoforming was employed in the Nizhnevartovsk gas – processing plant in August 1992 with a production capacity of 5000 tons of raw material per annum. The octane number has been achieved at a rate of 80 – 82 (MON) with a production yield of 82 – 85%. The period between service regeneration depended on the quality of the starting materials and varied in the range of 220 – 300 h.

The Glimar oil refinery (Gorlice, Poland) started to produce unleaded gasoline of the type Eurosuper – 95 with an octane number of 85 (MON) or 95 (RON) using straight – run gasoline as a starting material in February 1997. The production capacity was 40000 tons of raw materials per annum. The yields of the target products achieved – gasoline Eurosuper – 95 and liquidized natural gas – were 62 – 70% and 22 – 30%, respectively. The period between service regeneration varied within 250 – 350 h.

From presented data of development and application of the Zeoforming process in a small – scale plants in the world follows that this process is characterized by increased gas yield and, consequently, a low yield of the gasoline fraction. It was the reason for the limited use of this technology. In addition, the process is considered inefficient for large – scale production due to the necessity of frequent shutdowns for regeneration/replacement of the catalyst.

Thus, today, due to the science and technology developments, we have an opportunity to improve the Zeoforming process by engaging in the production of motor gasoline non – standard hydrocarbons, such as condensate, condensates of associated gas and etc., change the technological parameters of the process, as well as modernization or optimization of hardware equipment on the mathematical model in order to increase yield and quality of the gasoline fraction.

A. 1 Literature review

A. 1. 1 Analytical review of the hydrocarbons conversion schemes and the kinetic parameters of reactions on zeolite catalysts

The mechanism and kinetics of hydrocarbons reactions on zeolite catalysts has been reported in the numerous papers. According to most authors [4 – 14], the following reactions proceed on zeolites: isomerization, cracking, alkylation, dehydrocyclization, aromatization, condensation, etc. For example, the author [4] shows the chemical transformation of saturated acyclic and cyclic hydrocarbons on bifunctional catalyst (platinum on zeolite) into aromatic compounds by dehydrogenation without reducing the number of carbons of the products with respect to the substrates.

Figure A.1 presents the elementary transformations that take place in zeoforming process. These transformations include cyclization of acyclic compounds, isomerization of cyclic compounds into cyclohexane and dehydrogenation, and aromatization.

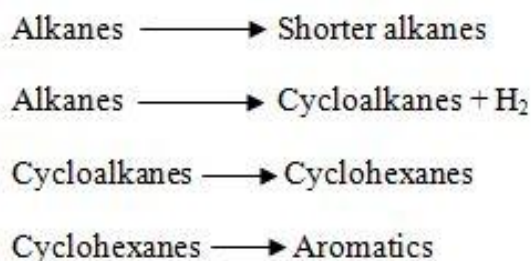


Figure A.1 – Elementary reactions occurring simultaneously in zeoforming of naphtha [4]

The authors [5, 6] show that the current industrial production of EB is based on benzene alkylation with ethene forming EB in the presence of an acid type catalyst Pt – containing ZSM – 5 (1% by weight) at a temperature of 390 – 440°C.

The first step of the commercial EB production is the reaction between benzene and ethene forming EB (Figure A.2 a) and the EB could further react with ethene forming DEBs (Figure A.2 b) and TEBs (Figure A.2 c). The later reactions are known as polyalkylation and the products of these reactions are polyethylbenzenes.

Subsequently, the transalkylation of polyethylbenzenes could take place until the thermodynamic equilibrium is reached (Figure A.2 d and e).

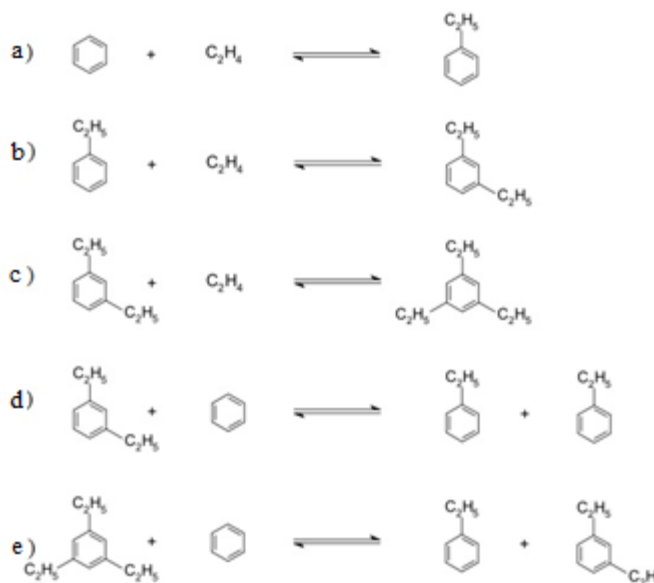


Figure A.2 – Alkylation of benzene with ethylene on zeolite catalysts:

a) production of ethylbenzene; b) and c) production of di – and polyethylbenzene;
d) and e) transalkylation of polyethylbenzenes [5, 6]

Also another reaction of benzene alkylation with ethane forming toluene and methane (Figure A.3 a) and the transalkylation of ethylbenzene (Figure A.3 b) in the presence of H – ZSM – 5 catalyst containing platinum at 450°C are possible.

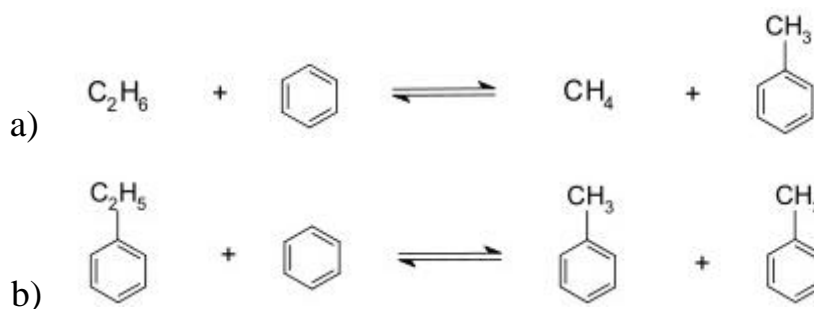


Figure A.3 – Alkylation reaction:

a) production of toluene and methane; b) production of toluene [5, 6]

Several elementary chemical reactions occur during the cracking of alkanes on the delaminated zeolite type ITQ – 2, containing nickel which is much better than Ni – USY and alumina in a temperature range of 340 – 460°C. These classes of reactions include shortening of the chain length of paraffinic hydrocarbons in a raw

material, isomerization of the linear into branched alkanes, ring closure and hydrogenation/dehydrogenation of the C – C bond.

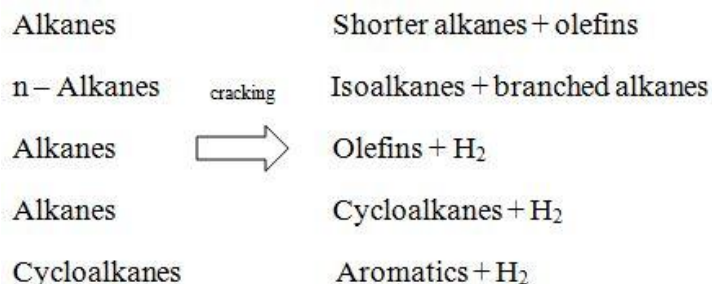
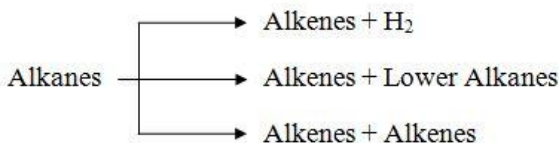


Figure A.4 – Elementary steps occurring simultaneously during cracking [4]

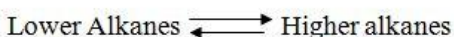
Many researchers [7 – 9] suggest that the conversion of light alkanes into aromatics on ZSM – 5 supported catalyst proceeds through three main stages, which are presented in Figure A.5:

- alkane transformation into alkenes;
- alkane oligomerisation and cracking;
- alkene aromatization.

1. Alkane conversion into alkenes



2. Alkene oligomerisation and cracking



3. Alkene aromatization

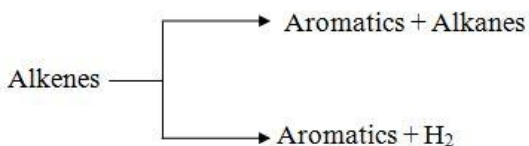


Figure A.5 – Reaction scheme of alkane aromatisation on ZSM – 5 catalysts [9]

The authors [10 – 11] proposed a scheme for aromatizing paraffinic hydrocarbons on ZSM – 5 catalysts, as shown in Figure A.6.

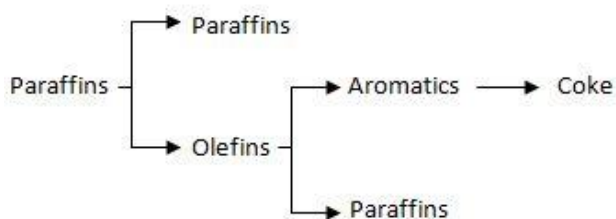


Figure A.6 – Aromatization of paraffins on ZSM – 5 catalysts [10 – 11]

The mechanism of the conversion of straight – run gasoline fractions into high – octane gasoline components on zeolite catalysts includes a number of sequential and parallel chemical reactions of the acid – base type involving the intermediate formation of carbonium cations. In general, the conversion of hydrocarbons includes the following basic steps [12]:

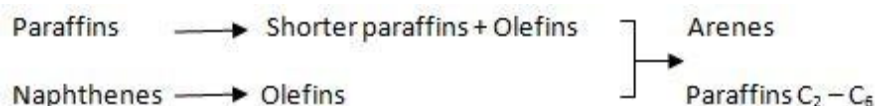


Figure A.7 – Conversion of hydrocarbons [12]

At the initial stage, the cleavage of a C – C bond of hydrocarbons and the formation of intermediate olefin fragments occur. At the next stage, olefins transform into paraffinic and aromatic hydrocarbons due to the processes of the migration and redistribution of hydrogen. Generally, the paraffinic hydrocarbons C_5 form an iso structure. Along with the basic processes, some side reactions take place, namely the alkylation of isoparaffinic hydrocarbons and aromatics by intermediate olefins and isomerization of paraffinic hydrocarbons and naphthenes [13 – 14].

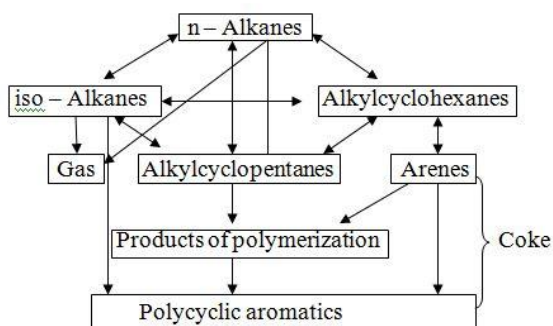


Figure A.8 – Conversion of hydrocarbons on zeolite catalysts [13]

It is evident that the presented schemes are somewhat different from each other. This is determined by using different composition and structure of the catalyst, different composition of raw materials and process conditions.

Kinetic parameters of the reactions are also dependent on the factors mentioned above. The literature [15] shows the results of theoretical and experimental study of the kinetics of hydrocarbons reactions on different zeolite catalysts. In the work the results of an experimental study of the kinetics of paraffins and naphthenes oxidation on the ZSM – 5 zeolite and propane aromatization on H – ZSM – 5 zeolite have been presented. The authors note that the aromatization proceeds through the intermediate formation of olefin, moreover the propane conversion and the formation of aromatic compounds occurs on various centers of the zeolite surface. The presented rate constants indicate a relatively low speed of dehydrogenation of propane and high speeds of cracking and aromatization.

Reactions of 2 – methylpentane on a bifunctional catalyst (platinum on zeolite) were studied in the paper [16]. The authors noted the high isomerization selectivity and low demethylation, cracking, and formation of methylcyclopentane in the temperature range of 160 – 200°C. The observed activation energy for isomerization reactions according to the partial pressures of hydrogen and 2 – methylpentane was in the range of 14 – 25 kcal /mol. Presence of platinum (2,9 wt%) and a high content of hydrogen in the reaction mixture does not allow extrapolation of kinetic parameters on the reaction of hydrocarbon, which occurring on a zeolite catalyst.

Kinetic parameters of methylation of ethylene and propylene on the proton form of zeolites are given in [17], in which the author has studied the reactions occurring during the conversion of methanol – to – hydrocarbons (MTH).

The paper [18] demonstrates that the rate of cracking of alkanes is primarily governed by adsorption of the alkane. For light n – alkanes it was shown that the decrease in the apparent activation energy of protolytic cracking with increasing alkane chain length was compensated for by an increase in the heat of adsorption,

resulting in a constant true energy of activation, independent of the carbon chain length.

A shortage of the experimental data for hydrocarbons cracking on zeolites, especially for multi – component mixtures, is noted in [19]. The kinetics of the cracking of n – hexane on ZSM – 5 zeolites at atmospheric pressure and in the temperature range of 823 – 923K is investigated in [20]. The diffusion of the reactants/products in the micropores of the catalyst is a limiting step of the process according to the authors. The activation energies of the cracking reactions are in the range of 123 – 128 kJ/mol, the effective diffusion coefficient of n – hexane is $130 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$.

Kinetic data of other types of hexane reactions on a zeolite catalyst are not shown in the work. Moreover, the process temperature is significantly higher than the temperature at which the refining of gasoline fractions is carried out. The rate constants and activation energies for certain types of reactions are given in [21]. The obtained values of the kinetic parameters are weakly dependent on the variations of raw material composition within typical industrial conditions. The heat of hydrocarbons adsorption on zeolite catalysts are given in [22].

Quantum – chemical calculations of the activation energy of C – C bond cleavage for the C_2 – C_4 hydrocarbons on zeolite catalysts and comparison with the experimental data have been presented in [19]. Acceptable accuracy for modeling the kinetics of calculations is shown. However, the growth of the carbon chain of the reacting molecules and the simultaneous occurrence of other types of reactions can significantly complicate the calculations and reduce their accuracy.

In general, there is a lack of experimental and calculated data on the rate constants and activation energies of hydrocarbons reactions on zeolite catalysts. There are practically no data on the thermodynamic characteristics of the calculations and their temperature dependences and also there is no general scheme of gasoline conversion on zeolites, which would allow predicting the composition of the final product conversion and thus the yield and octane number.

A. 1. 2 Technology of Zeoforming process

The Zeoforming process is used for conversion of straight – run gasoline fractions with a boiling temperature below 200°C into high – octane fuels on zeolite catalysts. Zeoforming is based on use of an acid – base active catalysts (type IC – 30) containing artificial zeolites with a high silica content. The catalyst was developed by BIC SB RAS [23].

For example, in the conversion of hydrocarbon fractions with tighter regime of processing (by increasing the reaction temperature), the yield of gasoline fractions are reduced due to the rise of gas formation. However, the final gasoline composition changed dramatically: content of n – paraffins and naphthenes are reduced and the proportion of high octane components – isoparaffins and aromatic hydrocarbons are increased. As a result, the octane number of hydrocarbon fractions are increased from 40 – 60 (MM) 85 – 88 (MM) [24].

Process flow diagram (PFD) of the Zeoforming process [25] is shown in Figure A.9. The feedstock I is collected by pump 12 from raw tank 10 with pressure of 1,0 – 1,2 MPa. Then materials are fed through a heat exchanger 7 in the reactor block (RB) RB – 2. On the first step materials I are fed initially in the tube space of the evaporator – superheater 2/1, where materials are vaporized and superheated up to the reaction temperature (360 – 460°C). On the next step materials are fed in the tube space of reactor 1/1, which is loaded with zeolite catalyst. In the tube space of the reactor 1/1 low octane feedstock are transformed into high – octane components and gaseous hydrocarbons on zeolite catalyst IC – 30 – 1 (reaction temperature is 360 – 460°C, a pressure is 1.0 MPa and a weight hourly space velocity (WHSV) is 2 hr⁻¹).

Zeoforming process is performed with gradual rise of reaction temperature from an initial reaction temperature of 360°C to a final temperature of 460°C during 150 hours for compensation of catalyst activity losses and, moreover, for maintaining the products quality and composition on the same constant level.

Raw material changes direction from the RB – 2 to RB – 1 after losses of catalytic activity in the reactor 1/1 due to the coking (after 150 hours of operation)

and reaching the final reaction temperature. In the RB – 1 the Zeoforming process proceeds, in the RB – 2 the catalyst regeneration is performed. In the reactor 1/2 switching of the feedstock from RB – 1 to RB – 2 after catalyst coking is produced.

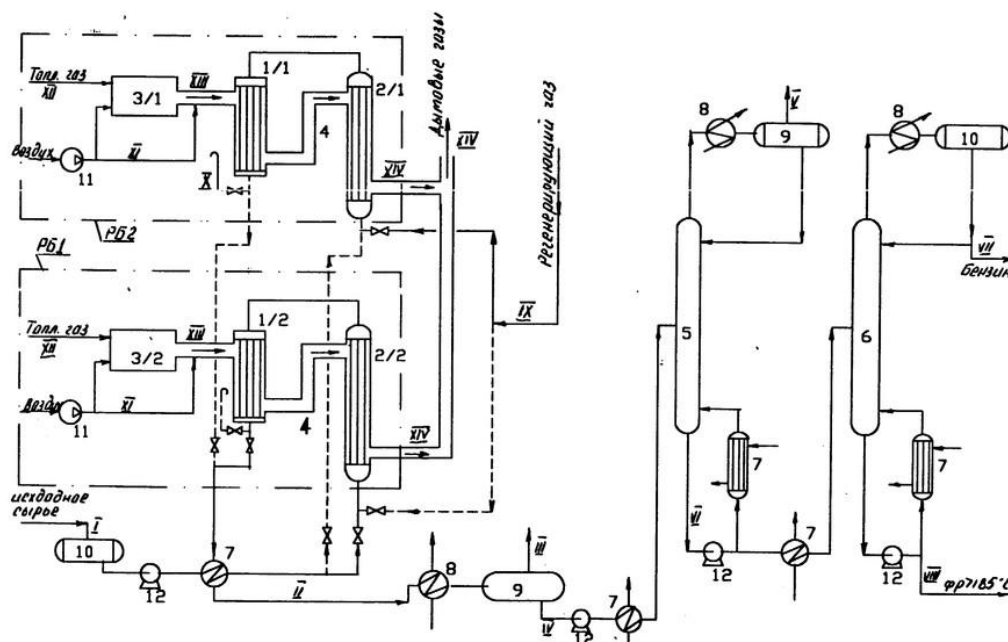


Figure A.9 – PFD of Zeoforming process [25]:

1/1, 1/2 – shell-and-tube reactor; 2/1, 2/2 – shell-and-tube heat exchanger;
 3/1, 3/2 – heat generator; 4 – flue; 5,6 – distillation columns; 7 – heat exchangers and
 heaters; 8 – coolers and condensers; 9 – separators; 10 – tank; 11 – blower pump;
 12 – pumps; RB – 1, RB – 2 – reactor blocks; I – feedstock; II – reaction products;
 III, V – hydrocarbon gases; IV – unstable catalysate; VI – stable catalysate; VII – high –
 octane gasoline; VIII – residue; IX – regenerant; X – regeneration gases; XI – air;
 XII – fuel gas; XIII – the gas coolant; XIV – the spent coolant

The reaction products II are cooled and condensed in the corresponding heat exchange equipment after the reactor and sent to the separator 9 for separation of hydrocarbon gases III from liquid unstable catalysate IV. Unstable catalysate IV from the separator 9 is fed to the heat exchanger 7 by the pump 12, where it is heated up to 100°C. Then unstable catalysate IV is fed to the distillation column – stabilizer 5 by pressure of 0.8 MPa and dissolved gases are released from the gasoline fraction.

The light fractions are withdrawn from the top of the stabilization column 5 at the temperature of 70°C. The light fractions are cooled and partially condensed in the

condenser 8. The fraction is fed into the separator 9 for separation of hydrocarbon gases V. The liquid distillate from the separator 9 is returned to column 5 as a cold reflux. Stable catalysate VI is withdrawn from the bottom of stabilization column 5 at the temperature of 120°C, part of the catalysate is preheated in a heat exchanger 7 to the temperature of 150°C and returned to the column 5 as "hot jets". The balance part of the column product 5 is fed to a distillation column 6 through a heat exchanger 7 (heated up to 200°C). Stable catalysate VI is separated into a gasoline fraction VII (fraction 35 – 195°C) and a residual fraction VIII (fraction > 185°C) under the pressure of 0,2 MPa.

The gasoline vapors VII are withdrawn from the top of the distillation column 6 at the temperature of 140°C, which are cooled and condensed in the condenser 8 and fed to the reflux tank 10. Part of the gasoline VII is supplied to column 6 as cold irrigation and the balance part is assigned as the target product of unleaded high – octane gasoline VII. Residual fraction of catalysate is withdrawn from the bottom of the column 6 at the temperature of 220°C, this fraction is partially directed through the heater 7, where it is heated up to the temperature of 240°C and fed to the column 6 as a "hot jets". The balance part of the column product is fed to a heat exchanger 7 for cooling and then withdrawn from the unit as a by – product VIII.

Hydrocarbon gases III and V, which are allocated in the separators 9, are withdrawn from the unit as a product or used wholly or partly as a fuel gas for the energy supply system.

Reactor block is shown in Figure A.10. The reactor unit is a collection of technological devices 1 – 3, which are incorporated for supplying therein the coolant gas through flue 4. Technological devices 1 – 3 are sequentially arranged along the gas coolant flow in the following order: a heat generator 3, a shell – and – tube reactor 1 and a shell – and tube – heat exchanger 2.

When the RB – 1 works in the gasoline production mode, the RB – 2 operates in regeneration mode of previously coked catalyst. The aim of regeneration mode is to control burning of coke by regenerating gas with specific oxygen content.

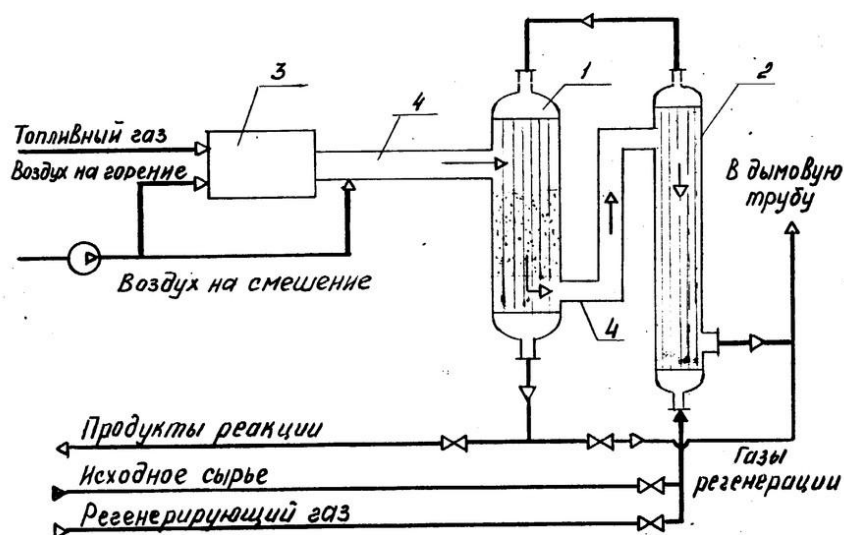


Figure A.10 – Scheme of reactor block [25]:

1 – shell – and tube – reactor; 2 – shell – and tube – heat exchanger; 3 – heat generator;
4 – flue

Regenerant IX is fed into the RB – 2 originally in the tube space of evaporator – superheater 2/2, where gas heated up to the temperature of 380°C. Then gas is fed into pipe section of the reactor 1/2. The catalyst regeneration process occurs at the temperature of 500 – 540°C. Exhaust gases X reset to a "candle" or chimney after regeneration of the reactor.

Temperature control of the catalyst in the reactors 1/1, 1/2 and heating of material flows, which are fed into the tube space of evaporator – superheaters 2/1, 2/2 (raw materials, regenerant) are provided by feeding gas agent in each reactor unit through the flue 4. The gaseous coolant is obtained by mixing in a specific ratio of high – temperature flue gas (flue gas are formed in the combustion of hydrocarbon fuel gas XII in the heat generators 3) and air XI in a heat generator mixing chambers 3/1, 3/2.

A working gas coolant XIII from heat generators 3/1, 3/2 is supplied initially in the shell side of the reactors 1/1, 1/2 by the flue 4. Then gas coolant XIII follows in the shell side of the evaporators – superheater 2/1, 2/2. The spent coolant XIV is discharged on the chimney.

Catalyst temperature regime is maintained by supplying othe gas agent with temperature of 500 – 600°C into the shell side of the reactor in the step of gasoline

production (by supplying additional heat to the catalyst for compensation the temperature drop of the process due to the chemical reactions with the endothermic heat effect).

Catalyst temperature regime is maintained by supplying the gas agent with temperature of 400 – 500°C into the shell side of the reactor in the catalyst regeneration step (to prevent the reaction temperature rise due to the exothermic heat of reaction).

As a result, from straight – run gasoline fraction with an octane number of 57 MM high – octane gasoline fractions such as: (35 – 195°C) 60,7% mass; residual fraction (> 180°C) 2,8% wt; hydrocarbon gases 36,5% wt can be obtained.

A. 1. 3 Features of reactors for hydrocarbons refining

Reactor is the main apparatus, which determines the efficiency and depth of the catalytic conversion process of raw materials. Catalytic fixed bed reactors are the most important type of reactor for the large – scale synthesis of basic chemicals and intermediates.

All reactors for catalytic processes should:

1. Provide a desired performance of the installation for raw materials;
2. Have the required reaction volume;
3. Create the required contact surface of interacting phases;
4. Maintain the necessary heat transfer in the process;
5. Maintain the desired catalyst activity.

From the hydromechanical processes point of view, reactor design should have a minimal flow resistance and provide uniform distribution of gaseous raw mixture throughout the reaction volume. Reducing the flow resistance allows reducing the operating pressure in the reactor, which decreases a metal consumption of the entire apparatus. The nonuniformity flow distribution has an effect on the performance of the reactor, which also leads to uneven coke deposition on the catalyst.

The industrial reactors have a well – known classification. All reactors are classified in accordance with:

1) A method of the process organization:

- Periodic reactors (each individual step proceeds at different times sequentially);

- Continuous reactors (all stages proceeds in parallel);

2) Processing environment:

- Homogeneous (gas phase, liquid phase, solid phase);

- Heterogeneous (catalytic processes);

3) Thermal regime:

- Adiabatic (there is no heat exchange with the environment. All heat generated or absorbed in a chemical reactions goes to the internal heat transfer, i.e. heating or cooling of the reaction mixture);

- Isothermal (temperature is constant by heat exchange with the environment);

- Polytropic (the heat of reaction is partially compensates by heat exchange with the environment, partly causes a temperature change in the reaction mixture);

4) The hydrodynamic conditions in the reactor:

- Reactors of ideal mixing (RIS) – it is a capacitive device with a mechanical impeller or circulation pump;

- A plug flow reactors (RIV) – tube reactor, the mixing has a local nature and is caused by the uneven distribution of flow rate, flow pulsations and twisting;

5) Direction of flow:

- An axial motion (along the axis from the top to bottom or from bottom to the top);

- A radial motion (from the periphery to the central tube by the radius).

The most common forms of the reactor are cylindrical and spherical forms. Let's consider a cylindrical reactor with a fixed bed catalyst.

According to [26, 27], the reactor is a cylindrical vessel made of steel. There is a fitting for input of a gaseous raw material at the top of reactor. Reactors are used

with an axial inlet of the gaseous raw material, and with a radial inlet. In the first case, the gaseous raw material passes through the catalyst from the top to bottom, the output of products is also carried out from the top (Figure A.11).

Fitting for inlet feedstock is provided with a uniform flow distribution across all of the apparatus section. In the second case [26] from the nozzle the central perforated pipe descends down the end of which is blanked off. Gas and feed stream moves through the catalyst from the wall of apparatus to the radial center as shown in Figure A.12.

The metallic wall of the reactor is protected by the lining. Moreover, inside the reactor a perforated steel beaker installed. There is a gas layer between the wall of beaker and the wall of the apparatus. The catalyst is placed in the reactor on a steel beaker with a continuous layer.

Porcelain balls are placed above or below the catalyst bed (depending on the direction of the reaction products outlet) to prevent catalyst entrainment. The lower catalyst layer is lying on the grille, which is further coated with metal mesh. Balls, mesh, and grille protect the outlet of the reactor from getting the catalyst together with the reaction products to it.

These reactors are called adiabatic. The adiabatic reactors are used only where the heat of reaction is low, or where there is only one major reaction pathway.

Reactors with the radial direction of mixture have much lower hydraulic resistance than reactors with the axial input. Moreover, reactors have the better distribution of the gaseous raw materials across all of the unit sections. For these reasons, the most preferable design is a reactor with the radial input of feedstock at the creation step of new installations and modernization of existing design.

In accordance with [29], development started with the adiabatic reactor (Figure A.13 A), which is on account of the adiabatic temperature change could be only operated to give a limited conversion. Higher conversions were achieved at the same mean temperature level when several adiabatic stages were introduced, with intermediate heating or cooling after each stage. The simplest form involves injecting hot or cold gas between the stages (Figure A.13 B).

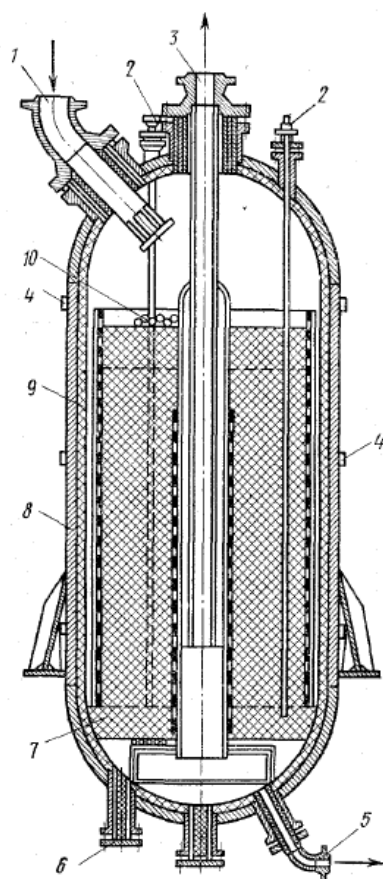


Figure A.11 – Reactor with the axial motion of the gaseous mixture [27]:
 1 – fitting for input of the raw materials;
 2 – zonal thermocouple; 3 – fitting for output of the products; 4 – an external thermocouple; 5 – fitting for output of the products at the ejecting of the system during regeneration of the catalyst;
 6 – fitting for the discharge of the catalyst;
 7 – fireclay; 8 – shell of the reactor;
 9 – lining; 10 – porcelain balls

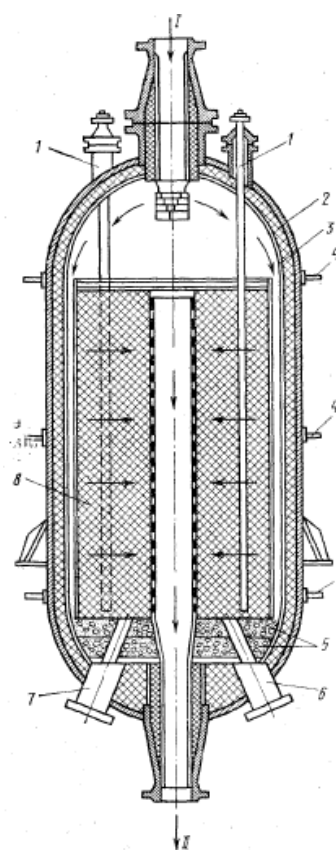


Figure A.12 – Reactor with the radial motion of the gaseous mixture [27]:
 1 – multispectral thermocouple; 2 – shell of the reactor; 3 – lining; 4 – surface thermocouple; 5 – porcelain balls;
 6 – fitting for output of the products at the ejecting of the system during regeneration of the catalyst; 7 – fitting for the discharge of the catalyst; 8 – catalyst; I – gaseous raw mixture; II – products of reaction

The next development was the replacement of injection cooling by interstage heat exchangers, through which the required or released heat of reaction is supplied or removed (Figure A.13 C).

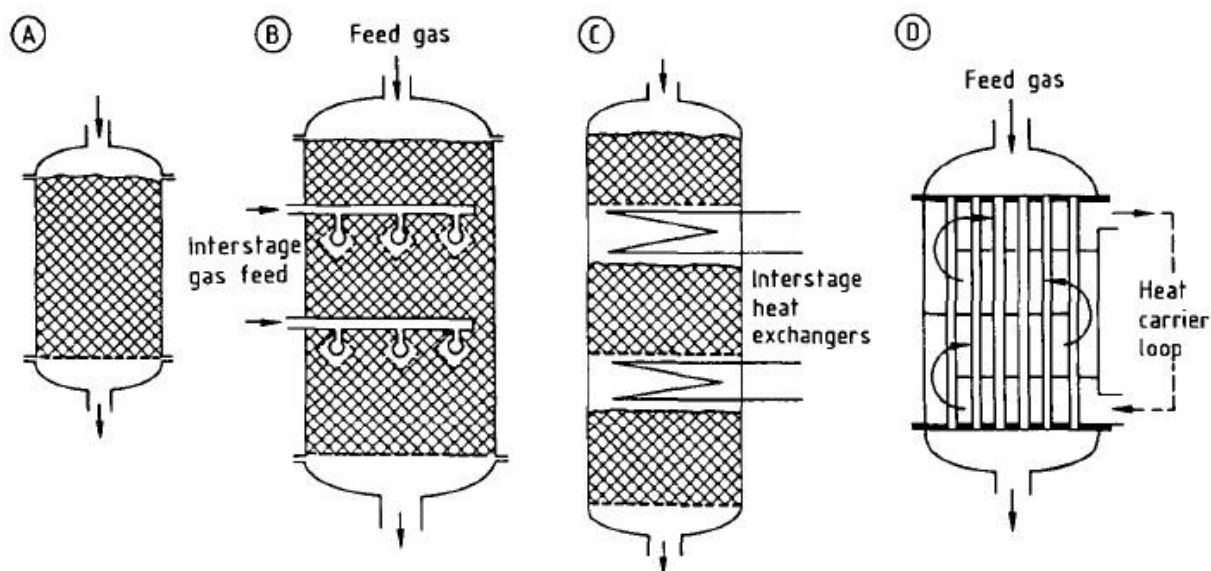


Figure A.13 – Development of fixed – bed reactors [29]:

- A) Single – bed adiabatic packed – bed reactor; B) Adiabatic reactor with interstage gas feed; C) Multitubed adiabatic fixed – bed reactor with interstage heat exchange; D) Multitubular fixed – bed reactor*

The multi tubular fixed – bed reactor is shown in figure A.13 D. Here the catalyst packing is located in the individual tubes of the tube bundle. The heat–transfer medium is circulated around the tube bundle and through an external heat exchanger, in which the heat of reaction is supplied or removed.

Let's now consider the spherical shape of the reactor. This form of the reactor is used at some plants abroad. Raw material is fed into the reactor through the nozzle 10 and is displayed in the bottom via the fitting 11. The distributor 4 provides the uniform distribution of the gaseous raw material across all of the apparatus section. Catalyst fall asleep on top of porcelain balls 8. Porcelain balls with different diameters are stacked in three rows at the bottom of the reactor on support grille with a grid to reduce the carryover of catalyst.

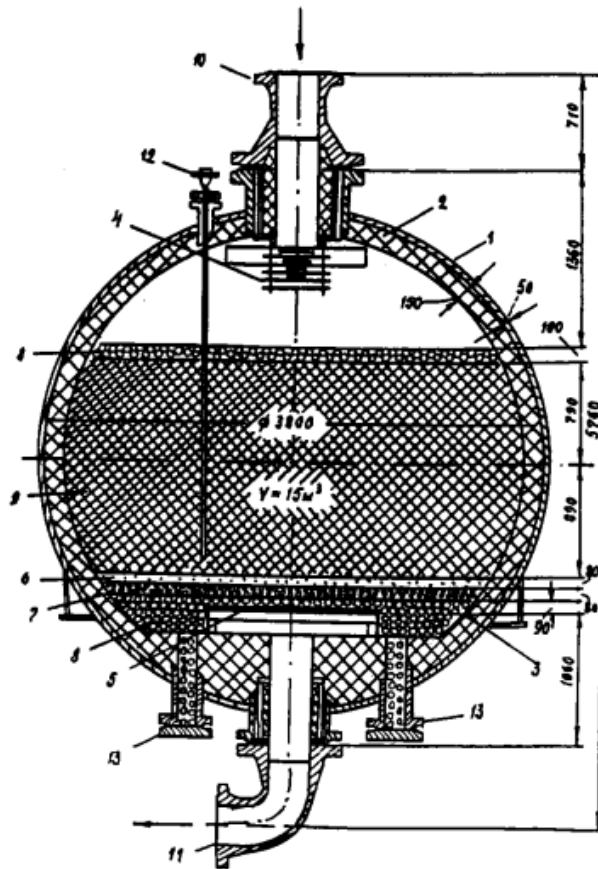


Figure A.14 – Spherical reactor with the axial direction of flow [28]:

1 – shell of the reactor; 2 – lining; 3 – support ring; 4 – distributor; 5 – support grille with a grid for the catalyst; 6, 7, 8 – porcelain balls with different diameters; 9 – catalyst; 10 – inlet of the raw material; 11 – outlet of the products; 12 – fitting for multizone thermocouples; 13 – hatch for unloading of the catalyst

The advantages of such apparatus are sufficiently uniform distribution of the feed stream, a small hydraulic resistance, which reduce the thickness of the reactor walls and, as a result, metal consumption too. However, there are significant drawbacks, such as the complexity to manufacture the reactors with such form, limiting the size of the reactor (diameter limited by dimensions of rolling stock). In domestic installations these reactors are not applied.

Приложение Б
(рекомендуемое)

Расчет термодинамических параметров реакций

Таблица Б.1 – Расчет параметров для реакции Гексан \leftrightarrow 2 – метилпентан

Химическая реакция	T, К	ΔG , кДж/моль	Kp	Ln(Kp)
Гексан \leftrightarrow 2 – метилпентан	593	-2,67	1,72	0,54
	603	-2,61	1,68	0,52
	613	-2,55	1,65	0,50
	623	-2,49	1,62	0,48
	633	-2,43	1,59	0,46
	643	-2,36	1,55	0,44
	653	-2,30	1,53	0,42
	663	-2,24	1,50	0,41
	673	-2,18	1,48	0,39
	683	-2,12	1,45	0,37
	693	-2,05	1,43	0,36
	703	-2,00	1,41	0,34
	713	-1,93	1,38	0,33
	723	-1,87	1,37	0,31

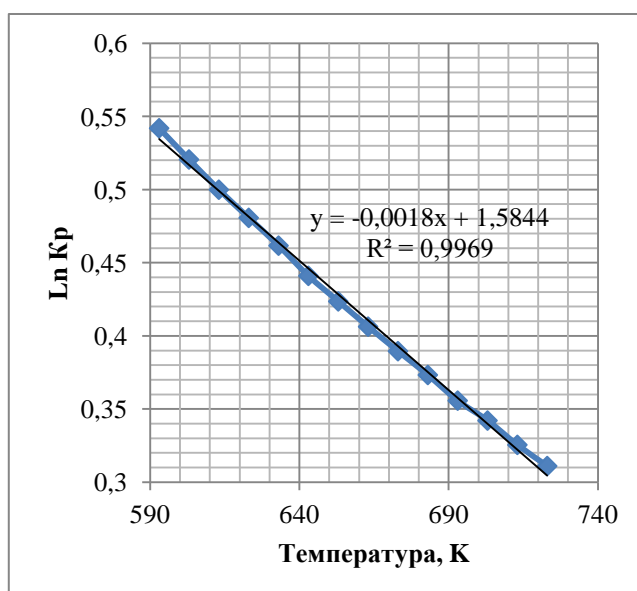


Рисунок Б.1 – Зависимость логарифма константы равновесия от температуры для реакции Гексан \leftrightarrow 2 – метилпентан

Таблица Б.2 – Расчет параметров для реакции Гексан ↔ 3 – метилпентан

Химическая реакция	T, К	ΔG , кДж/моль	Kp	Ln(Kp)
Гексан ↔ 3 – метилпентан	593	0,66	0,87	–0,14
	603	0,74	0,86	–0,15
	613	0,83	0,85	–0,16
	623	0,92	0,84	–0,18
	633	1	0,83	–0,19
	643	1,09	0,815	–0,20
	653	1,18	0,80	–0,22
	663	1,27	0,79	–0,23
	673	1,35	0,78	–0,24
	683	1,44	0,776	–0,25
	693	1,53	0,77	–0,26
	703	1,61	0,76	–0,27
	713	1,71	0,75	–0,29
	723	1,79	0,74	–0,30

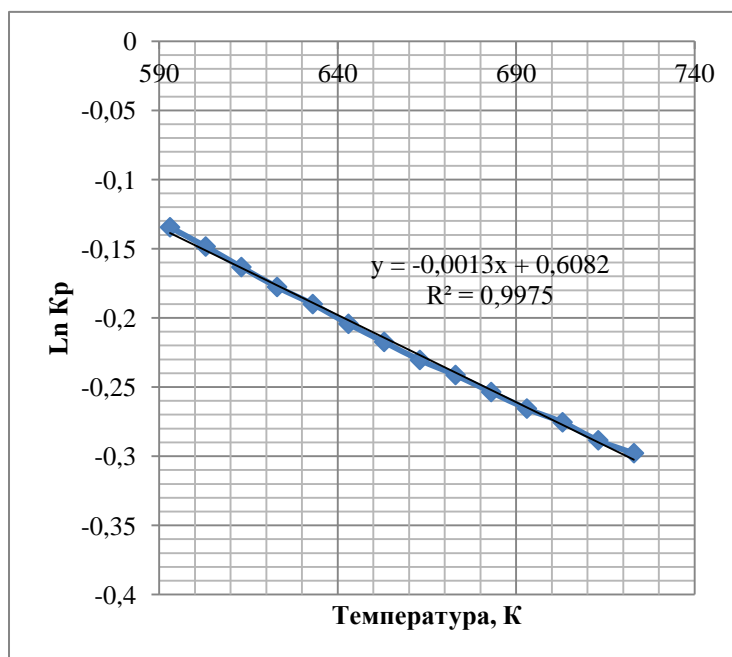


Рисунок Б.2 – Зависимость логарифма константы равновесия от температуры для реакции Гексан ↔ 3 – метилпентан

Таблица Б.3 – Расчет параметров для реакции 2 – метилпентан ↔ 3 – метилпентан

Химическая реакция	T, К	ΔG , кДж/моль	Kp	Ln(Kp)
2 – метилпентан ↔ 3 – метилпентан	593	3,33	0,508	–0,676
	603	3,35	0,512	–0,669
	613	3,38	0,515	–0,663
	623	3,41	0,518	–0,658
	633	3,43	0,521	–0,652
	643	3,45	0,525	–0,645
	653	3,48	0,527	–0,641
	663	3,51	0,529	–0,637
	673	3,53	0,532	–0,631
	683	3,56	0,534	–0,627
	693	3,58	0,537	–0,621
	703	3,61	0,539	–0,618
	713	3,64	0,541	–0,614
	723	3,66	0,544	–0,609

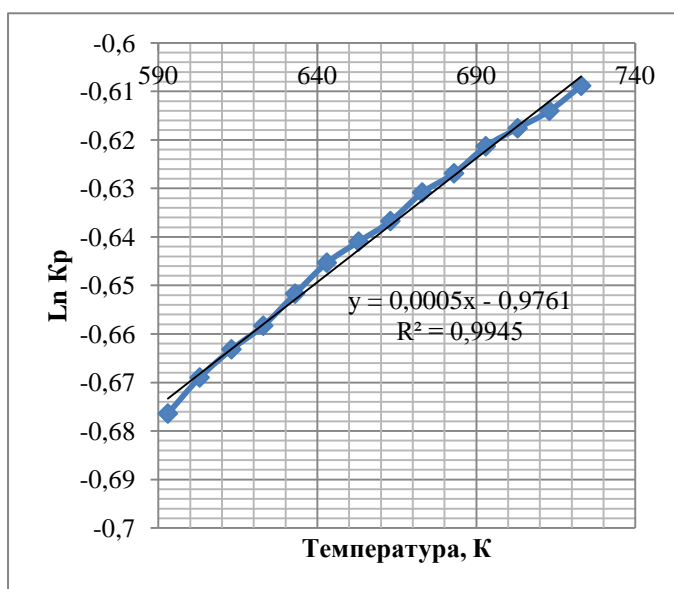


Рисунок Б.3 – Зависимость логарифма константы равновесия от температуры для реакции 2 – метилпентан ↔ 3 – метилпентан

Таблица Б.4 – Расчет параметров для реакции Гексан \leftrightarrow Циклогексан + H_2

Химическая реакция	T, К	ΔG , кДж/моль	Kp	Ln(Kp)
Гексан \leftrightarrow Циклогексан + H_2	593	20,76	0,015	-4,211
	603	20,09	0,018	-4,007
	613	19,68	0,021	-3,862
	623	19,27	0,024	-3,720
	633	18,87	0,028	-3,586
	643	18,46	0,032	-3,454
	653	18,06	0,036	-3,327
	663	17,65	0,041	-3,202
	673	17,24	0,046	-3,081
	683	16,84	0,051	-2,966
	693	16,43	0,058	-2,852
	703	16,02	0,064	-2,741
	713	15,61	0,072	-2,633
	723	15,19	0,079	-2,527

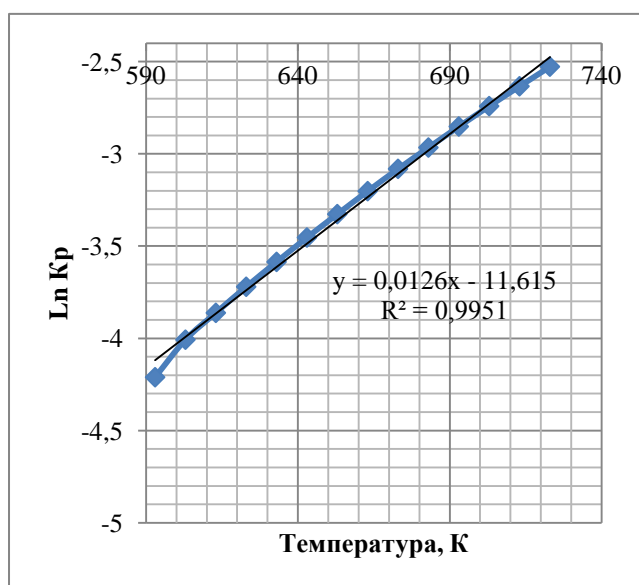


Рисунок Б.4 – Зависимость логарифма константы равновесия от температуры для реакции Гексан \leftrightarrow Циклогексан + H_2

Таблица Б.5 – Расчет параметров для реакции 2 – метилпентан \leftrightarrow Метилциклопентан + H_2

Химическая реакция	T, K	ΔG , кДж/моль	Kp	Ln(Kp)
2 – метилпентан \leftrightarrow Метилциклопентан+ H_2	593	14,69	0,051	-2,980
	603	13,83	0,063	-2,759
	613	12,96	0,079	-2,543
	623	12,09	0,097	-2,334
	633	11,22	0,119	-2,132
	643	10,34	0,144	-1,934
	653	9,46	0,175	-1,742
	663	8,59	0,211	-1,558
	673	7,72	0,252	-1,379
	683	6,85	0,299	-1,206
	693	5,97	0,355	-1,036
	703	5,1	0,418	-0,873
	713	4,22	0,491	-0,712
	723	3,33	0,575	-0,554

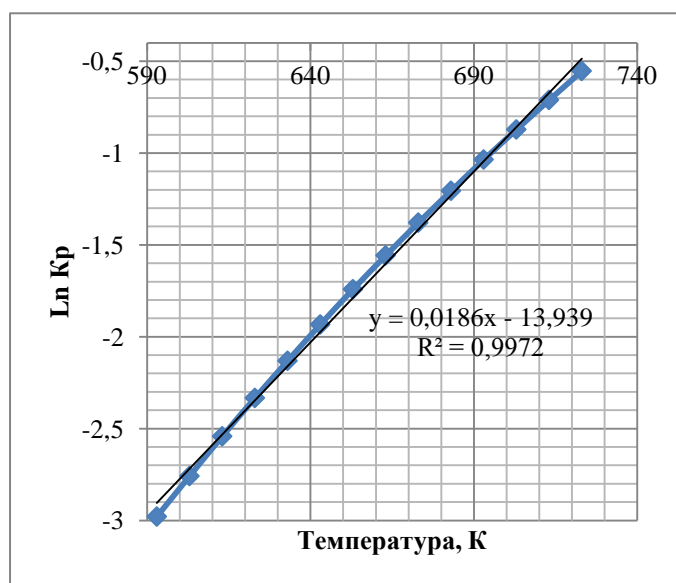


Рисунок Б.5 – Зависимость логарифма константы равновесия от температуры для реакции 2 – метилпентан \leftrightarrow Метилциклопентан + H_2

Таблица Б.6 – Расчет параметров для реакции 3 – метилпентан \leftrightarrow Метилциклопентан + H₂

Химическая реакция	T, К	ΔG , кДж/моль	Kp	Ln(Kp)
3 – метилпентан \leftrightarrow Метилциклопентан+ H ₂	593	11,36	0,099	-2,304
	603	10,48	0,124	-2,091
	613	9,58	0,153	-1,879
	623	8,68	0,187	-1,676
	633	7,79	0,228	-1,480
	643	6,89	0,276	-1,289
	653	5,98	0,332	-1,101
	663	5,08	0,398	-0,922
	673	4,19	0,473	-0,749
	683	3,29	0,560	-0,579
	693	2,39	0,660	-0,415
	703	1,49	0,775	-0,255
	713	0,58	0,907	-0,098
	723	-0,33	1,056	0,055

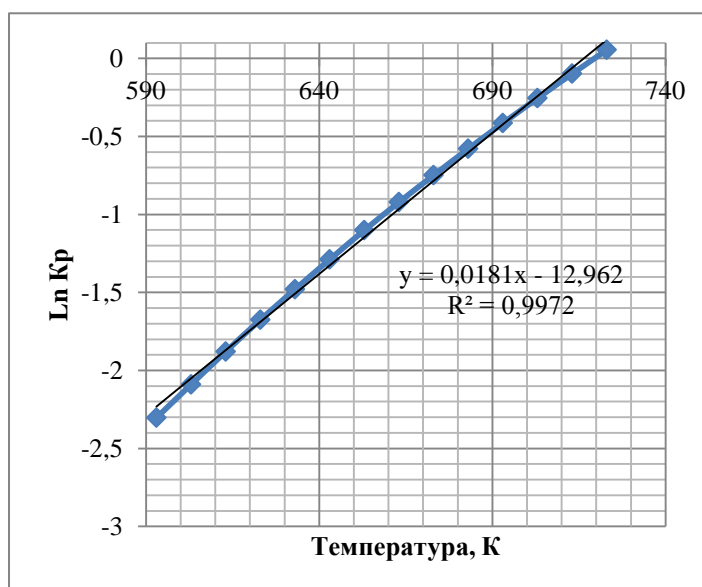


Рисунок Б.6 – Зависимость логарифма константы равновесия от температуры для реакции 3 – метилпентан \leftrightarrow Метилциклопентан + H₂

Таблица Б.7 – Расчет параметров для реакции Циклогексан \leftrightarrow Бензол + H_2

Химическая реакция	T, К	ΔG , кДж/моль	Kp	Ln(Kp)
Циклогексан \leftrightarrow Бензол + H_2	593	-15,04	21,128	3,051
	603	-18,72	41,848	3,734
	613	-22,66	85,386	4,447
	623	-16,94	26,325	5,137
	633	-30,57	333,198	5,809
	643	-34,51	636,136	6,455
	653	-38,47	1195,08	7,086
	663	-42,42	2198,83	7,696
	673	-46,36	3965,92	8,286
	683	-50,32	7055,44	8,862
	693	-54,26	12302,0	9,418
	703	-58,22	21185,9	9,961
	713	-62,18	35933,0	10,489
	723	-66,15	60111,3	11,004

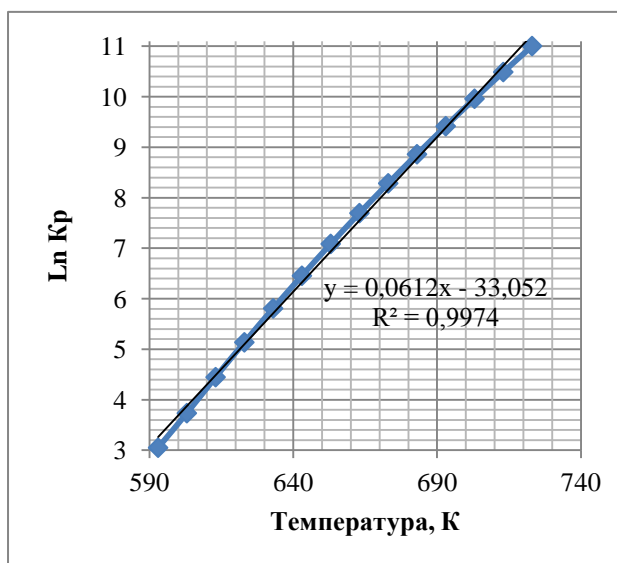


Рисунок Б.7 – Зависимость логарифма константы равновесия от температуры для реакции Циклогексан \leftrightarrow Бензол + H_2

Таблица Б.8 – Расчет параметров для реакции Метилциклопентан \leftrightarrow Бензол + H_2

Химическая реакция	T, К	ΔG , кДж/моль	Kp	Ln(Kp)
Метилциклопентан \leftrightarrow Бензол + H_2	593	-6,30	3,589	1,278
	603	-9,85	7,139	1,965
	613	-13,39	13,850	2,628
	623	-16,94	26,325	3,271
	633	-20,49	49,077	3,893
	643	-24,03	89,571	4,495
	653	-27,57	160,49	5,078
	663	-31,12	283,06	5,646
	673	-34,66	490,03	6,194
	683	-38,21	836,26	6,729
	693	-41,75	1402,83	7,246
	703	-45,30	2322,86	7,751
	713	-48,86	3798,66	8,242
	723	-52,42	6123,05	8,720

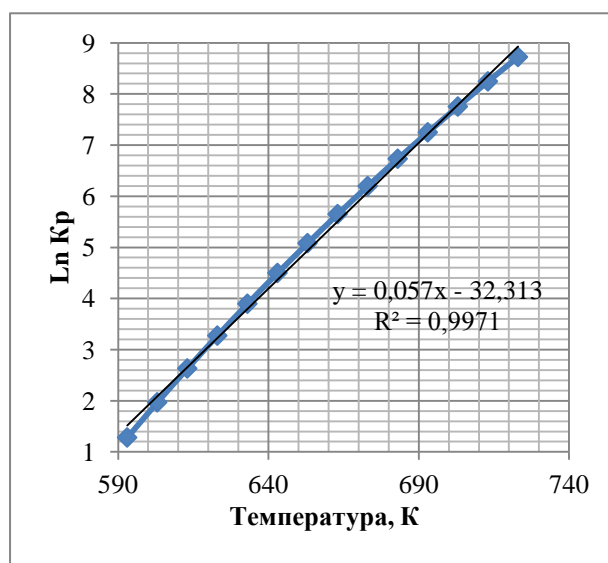


Рисунок Б.8 – Зависимость логарифма константы равновесия от температуры для реакции Метилциклопентан \leftrightarrow Бензол + H_2

Таблица Б.9 – Расчет параметров для реакции 2 – метилпентан \leftrightarrow 2,3–диметилбутан

Химическая реакция	T, К	ΔG , кДж/моль	Kp	Ln(Kp)
2 – метилпентан \leftrightarrow 2,3–диметилбутан	593	5,65	0,318	–1,146
	603	5,82	0,313	–1,160
	613	5,99	0,309	–1,175
	623	6,16	0,304	–1,189
	633	6,33	0,300	–1,203
	643	6,49	0,297	–1,214
	653	6,66	0,293	–1,227
	663	6,83	0,289	–1,238
	673	6,99	0,286	–1,250
	683	7,16	0,283	–1,261
	693	7,33	0,280	–1,272
	703	7,50	0,277	–1,283
	713	7,67	0,274	–1,294
	723	7,83	0,271	–1,303

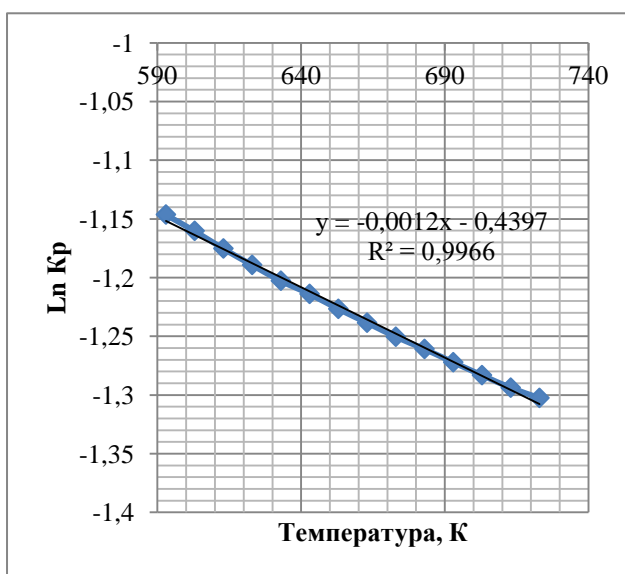


Рисунок Б.9 – Зависимость логарифма константы равновесия от температуры для реакции 2 – метилпентан \leftrightarrow 2,3 – диметилбутан

Таблица Б.10 – Расчет параметров для реакции 3 – метилпентан \leftrightarrow 2,2–диметилбутан

Химическая реакция	T, К	ΔG , кДж/моль	Kp	Ln(Kp)
3 – метилпентан \leftrightarrow 2,2–диметилбутан	593	–1,19	1,275	0,243
	603	–0,99	1,218	0,198
	613	–0,79	1,168	0,155
	623	–0,61	1,125	0,118
	633	–0,38	1,075	0,072
	643	–0,18	1,034	0,034
	653	0,01	0,998	–0,002
	663	0,2	0,964	–0,036
	673	0,42	0,928	–0,075
	683	0,62	0,897	–0,109
	693	0,82	0,867	–0,142
	703	1,02	0,839	–0,175
	713	1,21	0,815	–0,204
	723	1,4	0,792	–0,233

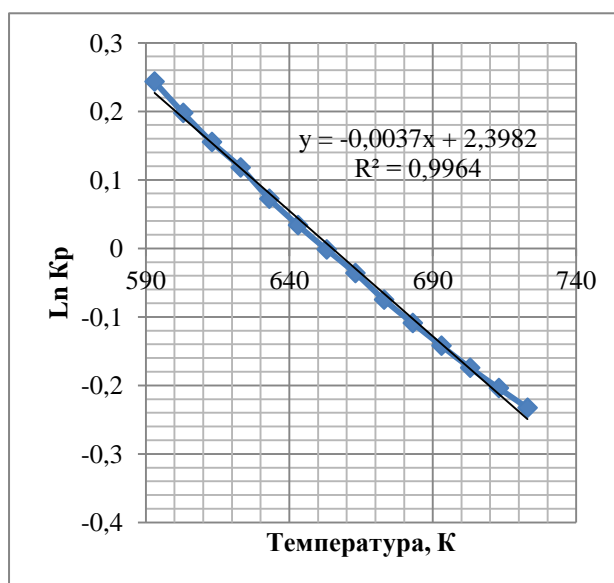


Рисунок Б.10 – Зависимость логарифма константы равновесия от температуры для реакции 3 – метилпентан \leftrightarrow 2,2 – диметилбутан

Таблица Б.11 – Расчет параметров для реакции 2,2 – диметилбутан \leftrightarrow 2,3 – диметилбутан

Химическая реакция	T, К	ΔG , кДж/моль	Kp	Ln(Kp)
2,2 – диметилбутан \leftrightarrow 2,3 – диметилбутан	593	3,52	0,490	–0,713
	603	3,45	0,502	–0,689
	613	3,40	0,513	–0,667
	623	3,36	0,523	–0,649
	633	3,28	0,536	–0,623
	643	3,22	0,548	–0,602
	653	3,17	0,558	–0,584
	663	3,12	0,568	–0,566
	673	3,05	0,580	–0,545
	683	2,98	0,592	–0,525
	693	2,93	0,601	–0,508
	703	2,87	0,612	–0,491
	713	2,82	0,621	–0,476
	723	2,77	0,631	–0,461

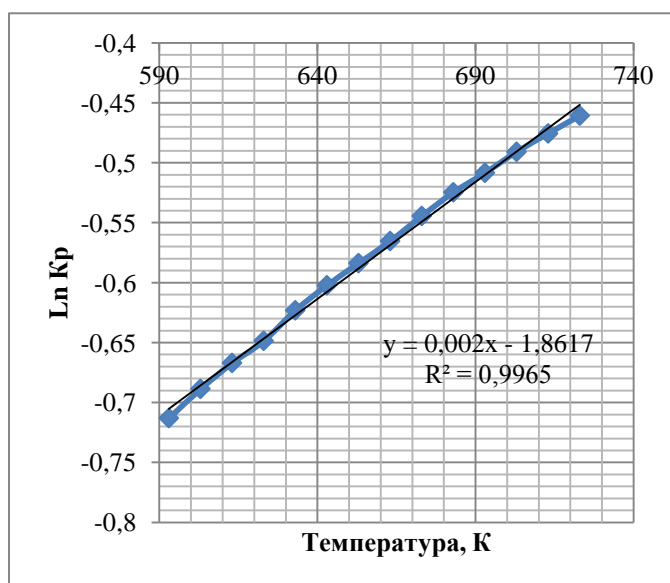


Рисунок Б.11 – Зависимость логарифма константы равновесия от температуры для реакции 2,2 – диметилбутан \leftrightarrow 2,3 – диметилбутан

Таблица Б.12 – Расчет параметров для реакции Гексан → Бутан + Этилен

Химическая реакция	T, К	ΔG , кДж/моль	Kp	Ln(Kp)
Гексан → Бутан + Этилен	593	10,06	0,129	-2,041
	603	8,68	0,177	-1,731
	613	7,30	0,239	-1,433
	623	5,93	0,318	-1,144
	633	4,55	0,421	-0,865
	643	3,18	0,551	-0,595
	653	1,81	0,717	-0,333
	663	0,43	0,925	-0,078
	673	-0,94	1,183	0,168
	683	-2,32	1,504	0,408
	693	-3,69	1,897	0,641
	703	-5,06	2,379	0,867
	713	-6,42	2,956	1,084
	723	-7,79	3,657	1,297

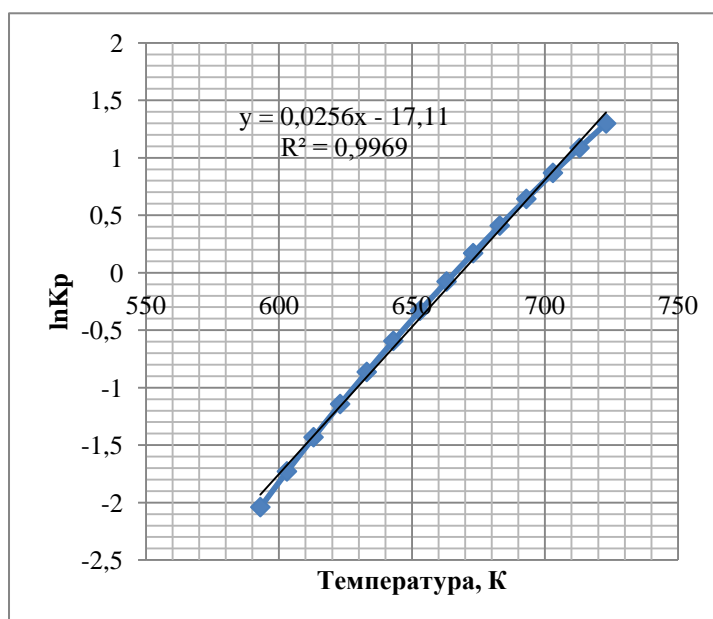


Рисунок Б.12 – Зависимость логарифма константы равновесия от температуры для реакции Гексан → Бутан + Этилен

Таблица Б.13 – Расчет параметров для реакции Гексан → Этан + Бутен

Химическая реакция	T, К	ΔG , кДж/моль	Kp	Ln(Kp)
Гексан → Этан + Бутен	593	–3,81	2,164	0,772
	603	–5,22	2,834	1,042
	613	–6,62	3,668	1,299
	623	–8,03	4,712	1,550
	633	–9,43	6,004	1,792
	643	–10,83	7,587	2,026
	653	–12,24	9,527	2,254
	663	–13,64	11,882	2,475
	673	–15,04	14,712	2,689
	683	–16,45	18,108	2,896
	693	–17,85	22,156	3,098
	703	–19,25	26,950	3,294
	713	–20,64	32,505	3,481
	723	–22,03	39,067	3,665

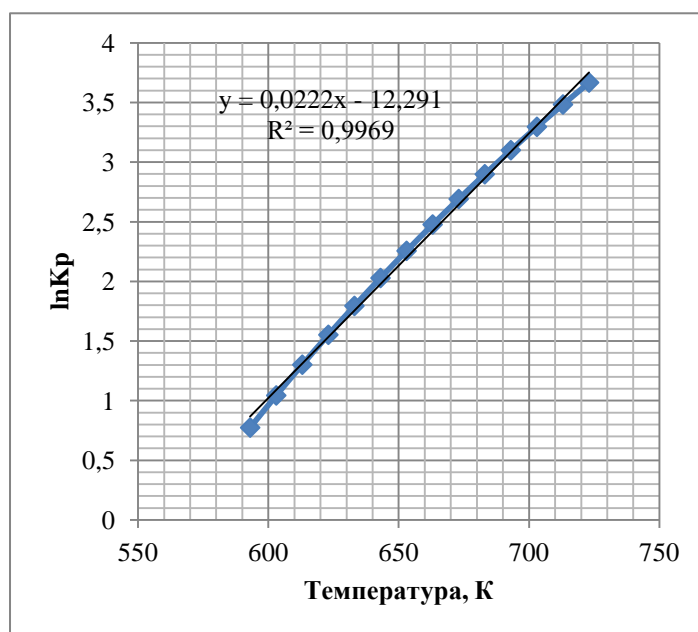


Рисунок Б.13 – Зависимость логарифма константы равновесия от температуры для реакции Гексан → Этан + Бутен

Таблица Б.14 – Расчет параметров для реакции Гексан → Метан + Пентен

Химическая реакция	T, К	ΔG , кДж/моль	Kp	Ln(Kp)
Гексан → Метан + Пентен	593	-13,59	15,735	2,756
	603	-15,01	19,967	2,994
	613	-16,41	25,039	3,220
	623	-17,82	31,193	3,440
	633	-19,22	38,565	3,652
	643	-20,62	47,353	3,858
	653	-22,03	57,815	4,057
	663	-23,43	70,153	4,251
	673	-24,83	84,634	4,438
	683	-26,23	101,49	4,619
	693	-27,64	121,19	4,797
	703	-29,04	143,87	4,969
	713	-30,43	169,50	5,133
	723	-31,82	199,13	5,294

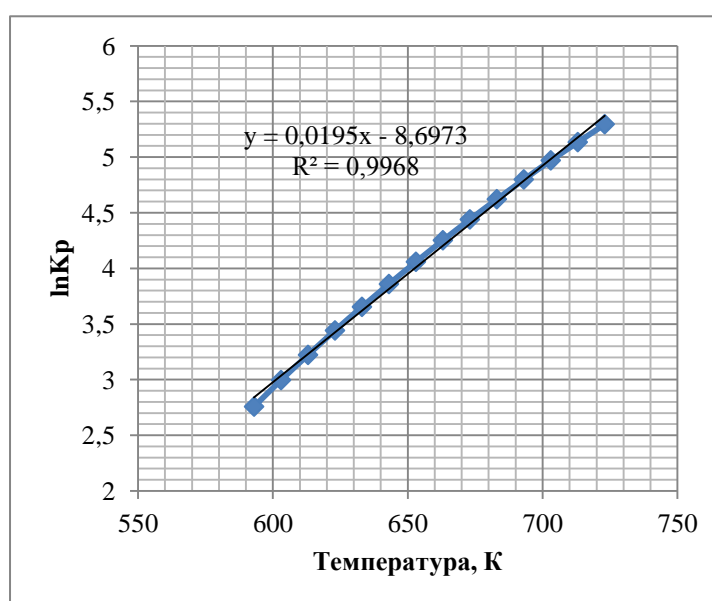


Рисунок Б.14 – Зависимость логарифма константы равновесия от температуры для реакции Гексан → Метан + Пентен

Таблица Б.15 – Расчет параметров для реакции Гексан → Пропан + Пропен

Химическая реакция	T, К	ΔG , кДж/моль	Kp	Ln(Kp)
Гексан → Пропан + Пропен	593	–3,43	2,003	0,695
	603	–4,86	2,635	0,969
	613	–6,27	3,425	1,231
	623	–7,69	4,418	1,486
	633	–9,11	5,651	1,732
	643	–10,53	7,170	1,969
	653	–11,95	9,039	2,202
	663	–13,37	11,310	2,426
	673	–14,79	14,059	2,643
	683	–16,21	17,366	2,854
	693	–17,63	21,318	3,059
	703	–19,05	26,014	3,259
	713	–20,44	31,162	3,449
	723	–21,85	37,914	3,635

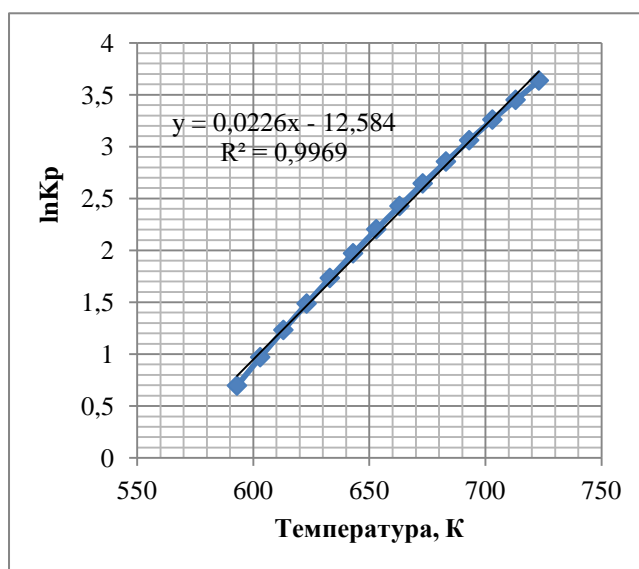


Рисунок Б.15 – Зависимость логарифма константы равновесия от температуры для реакции Гексан → Пропан + Пропен

Таблица Б.16 – Расчет параметров для реакции Гексан + \rightarrow Пропан + Пропан

Химическая реакция	T, К	ΔG , кДж/моль	Kp	Ln(Kp)
Гексан \rightarrow Пропан + Пропан	593	-50,24	26635	10,190
	603	-50,31	22791	10,034
	613	-50,35	19502	9,878
	623	-50,39	16784	9,728
	633	-50,43	14509	9,582
	643	-50,47	12594	9,441
	653	-50,52	10987	9,304
	663	-50,56	9621	9,172
	673	-50,59	8459	9,043
	683	-50,64	7465	8,918
	693	-50,68	6611	8,797
	703	-51,30	6489	8,778
	713	-51,26	5696	8,648
	723	-51,23	5027	8,523

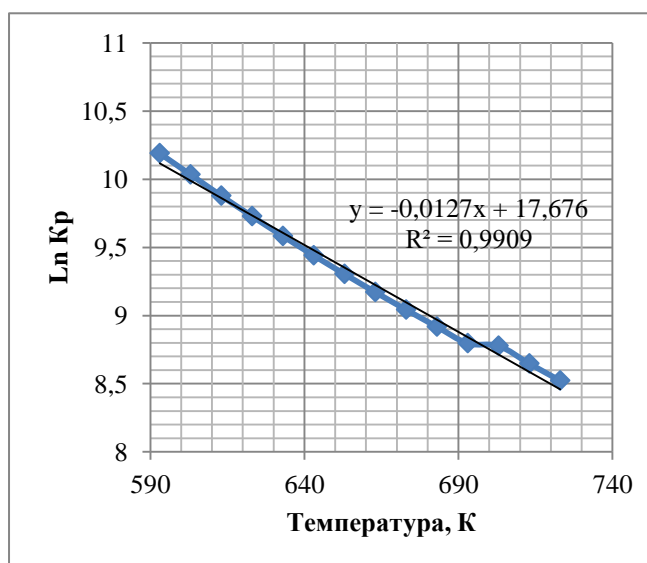


Рисунок Б.16 – Зависимость логарифма константы равновесия от температуры для реакции Гексан \rightarrow Пропан + Пропан

Таблица Б.17 – Расчет параметров для реакции 2 – метилпентан \leftrightarrow 2 – метилпентен

Химическая реакция	T, К	ΔG , кДж/моль	Kp	Ln(Kp)
2 – метилпентан \leftrightarrow 2 – метилпентен	593	41,78	0,0002	–8,475
	603	40,36	0,0003	–8,051
	613	38,94	0,0005	–7,641
	623	37,51	0,0007	–7,242
	633	36,11	0,0011	–6,861
	643	34,65	0,0015	–6,482
	653	33,23	0,0022	–6,121
	663	31,80	0,0031	–5,769
	673	30,39	0,0044	–5,431
	683	28,99	0,0061	–5,105
	693	27,53	0,0084	–4,779
	703	26,09	0,0115	–4,464
	713	24,66	0,0156	–4,16
	723	23,22	0,0210	–3,863

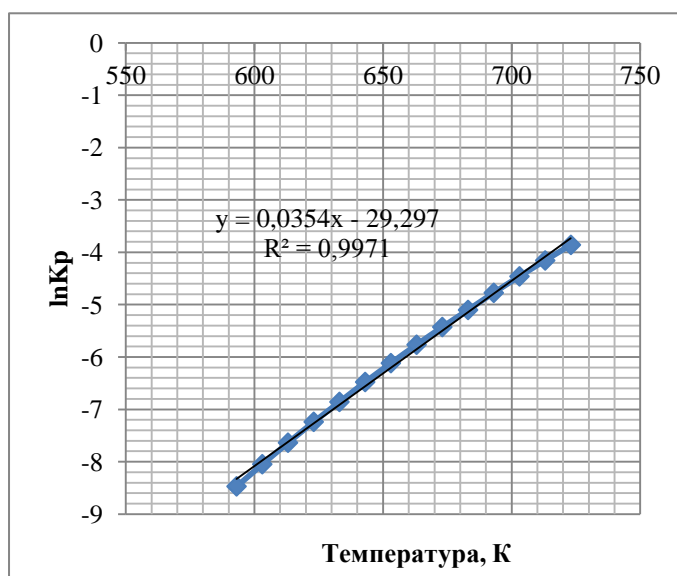


Рисунок Б.17 – Зависимость логарифма константы равновесия от температуры для реакции 2 – метилпентан \leftrightarrow 2 – метилпентен

Таблица Б.18 – Расчет параметров для реакции 2 – метилпентен ↔ Метилциклопентан

Химическая реакция	T, K	ΔG , кДж/моль	Kp	Ln(Kp)
2 – метилпентен ↔ Метилциклопентан	593	-27,09	243,399	5,495
	603	-26,52	198,321	5,289
	613	-25,98	163,634	5,098
	623	-25,42	135,327	4,908
	633	-24,87	112,804	4,726
	643	-24,31	94,388	4,547
	653	-23,77	79,703	4,378
	663	-23,21	67,402	4,211
	673	-22,67	57,489	4,052
	683	-22,11	49,090	3,894
	693	-21,55	42,109	3,740
	703	-21,0	36,342	3,593
	713	-20,44	31,441	3,448
	723	-19,89	27,356	3,309

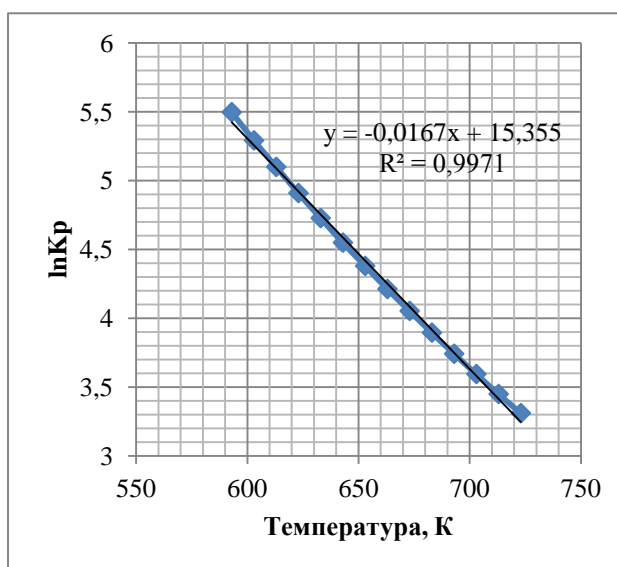


Рисунок Б.18 – Зависимость логарифма константы равновесия от температуры для реакции 2 – метилпентен ↔ Метилциклопентан

Таблица Б.19 – Расчет параметров для реакции 3 – метилпентан ↔ 3 – метилпентен

Химическая реакция	T, К	ΔG , кДж/моль	Kp	Ln(Kp)
3 – метилпентан ↔ 3 – метилпентен	593	48,11	0,00005	–9,757
	603	46,69	0,00009	–9,313
	613	45,22	0,00014	–8,873
	623	43,77	0,00021	–8,450
	633	42,31	0,00032	–8,039
	643	40,87	0,00048	–7,645
	653	39,41	0,00070	–7,259
	663	37,96	0,00102	–6,887
	673	36,51	0,00147	–6,525
	683	35,06	0,00208	–6,174
	693	33,60	0,00293	–5,832
	703	32,15	0,00408	–5,501
	713	30,69	0,00564	–5,177
	723	29,22	0,00774	–4,861

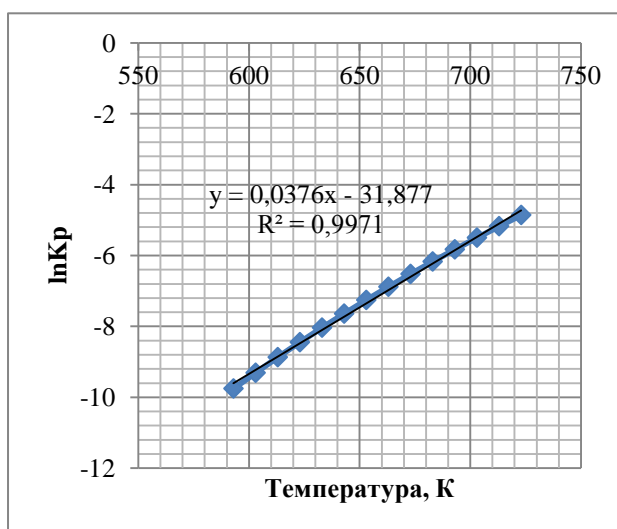


Рисунок Б.19 – Зависимость логарифма константы равновесия от температуры для реакции 3 – метилпентан ↔ 3 – метилпентен

Таблица Б.20 – Расчет параметров для реакции 3 – метилпентен ↔ Метилциклопентан

Химическая реакция	T, К	ΔG , кДж/моль	Kp	Ln(Kp)
3 – метилпентен ↔ Метилциклопентан	593	–36,75	1725,45	7,453
	603	–36,19	1364,76	7,219
	613	–35,64	1089,05	6,993
	623	–35,09	875,35	6,775
	633	–34,53	707,11	6,561
	643	–33,98	576,09	6,356
	653	–33,43	472,31	6,158
	663	–32,88	389,54	5,965
	673	–32,32	322,55	5,776
	683	–31,77	269,03	5,595
	693	–31,21	225,18	5,417
	703	–30,66	189,76	5,246
	713	–30,11	160,68	5,079
	723	–29,55	136,45	4,916

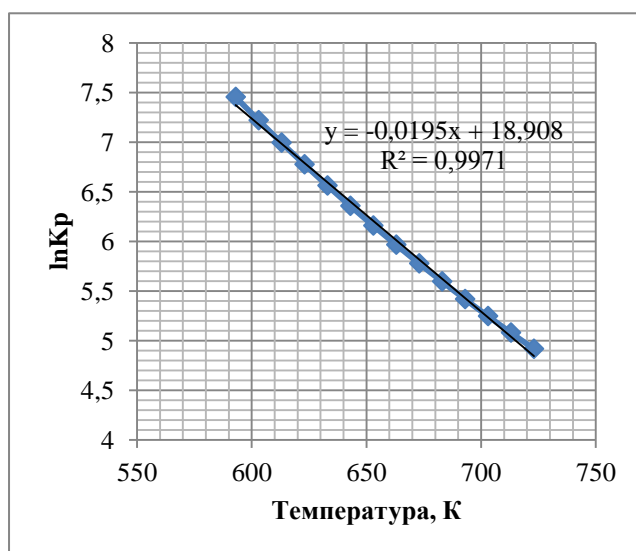


Рисунок Б.20 – Зависимость логарифма константы равновесия от температуры для реакции 3 – метилпентен ↔ Метилциклопентан

Таблица Б.21 – Расчет параметров для реакции Гексан \leftrightarrow Гексен + H_2

Химическая реакция	T, К	ΔG , кДж/моль	Kp	Ln(Kp)
Гексан \leftrightarrow Гексен + H_2	593	48,61	0,00005	-9,859
	603	47,25	0,00008	-9,425
	613	45,88	0,00012	-9,003
	623	44,51	0,00019	-8,593
	633	43,14	0,00028	-8,197
	643	41,77	0,00040	-7,814
	653	40,4	0,00059	-7,442
	663	39,03	0,00084	-7,081
	673	37,66	0,00119	-6,731
	683	36,29	0,00168	-6,392
	693	34,93	0,00233	-6,063
	703	33,55	0,00321	-5,740
	713	32,18	0,00439	-5,429
	723	30,81	0,00594	-5,126

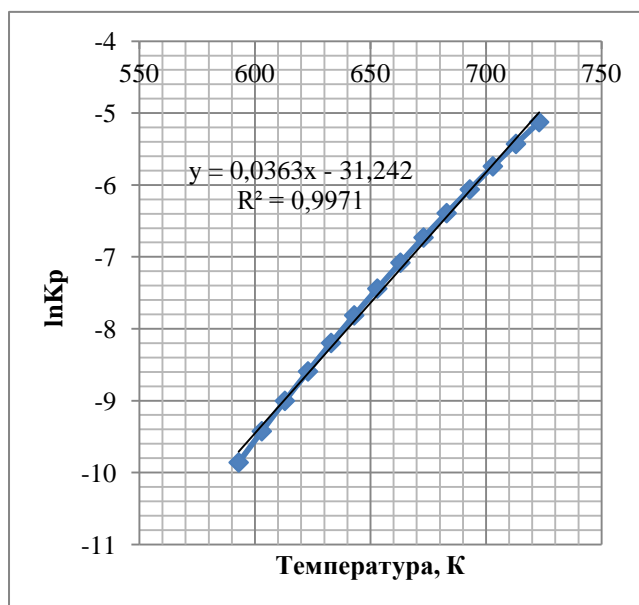


Рисунок Б.21 – Зависимость логарифма константы равновесия от температуры для реакции Гексан \leftrightarrow Гексен + H_2

Таблица Б.22 – Расчет параметров для реакции Гексен \leftrightarrow Циклогексан

Химическая реакция	T, К	ΔG , кДж/моль	Kp	Ln(Kp)
Гексен \leftrightarrow Циклогексан	593	-27,89	286,28	5,657
	603	-27,16	225,32	5,417
	613	-26,21	171,19	5,143
	623	-25,24	130,71	4,873
	633	-24,27	100,65	4,612
	643	-23,31	78,28	4,360
	653	-22,34	61,25	4,115
	663	-21,36	48,18	3,875
	673	-20,42	38,45	3,649
	683	-19,45	30,70	3,424
	693	-18,49	24,76	3,209
	703	-17,53	20,07	2,999
	713	-16,57	16,37	2,795
	723	-15,62	13,44	2,599

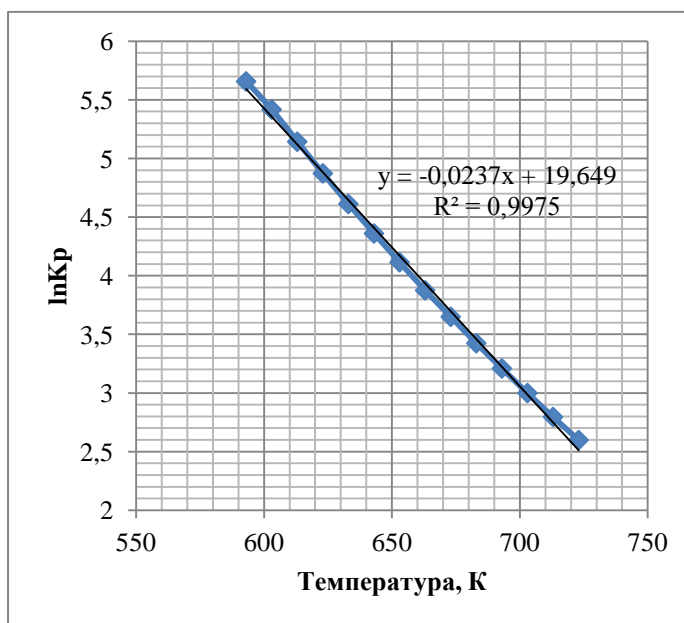


Рисунок Б.22 – Зависимость логарифма константы равновесия от температуры для реакции Гексен \leftrightarrow Циклогексан

Таблица Б.23 – Расчет параметров для реакции Бензол + Этилен \leftrightarrow Этилбензол

Химическая реакция	T, К	ΔG , кДж/моль	Kp	Ln(Kp)
Бензол + Этилен \leftrightarrow Этилбензол	593	-29,98	437,39	6,081
	603	-28,71	306,72	5,726
	613	-27,45	218,94	5,389
	623	-26,22	157,98	5,063
	633	-24,97	115,08	4,746
	643	-23,74	84,81	4,440
	653	-22,49	62,97	4,143
	663	-21,24	47,18	3,854
	673	-20,01	35,72	3,576
	683	-18,76	27,21	3,304
	693	-17,52	20,93	3,041
	703	-16,28	16,21	2,785
	713	-15,05	12,67	2,539
	723	-13,82	9,97	2,299

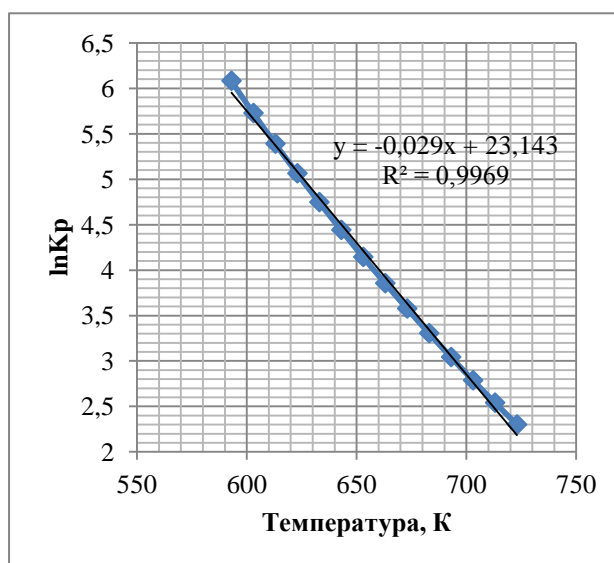


Рисунок Б.23 – Зависимость логарифма константы равновесия от температуры для реакции Бензол + Этилен \leftrightarrow Этилбензол

Таблица Б.24 – Расчет параметров для реакции Бензол + Этан \leftrightarrow Толуол

Химическая реакция	T, К	ΔG , кДж/моль	Kp	Ln(Kp)
Бензол + Этан \leftrightarrow Толуол	593	–4,70	2,59	0,954
	603	–5,78	3,17	1,153
	613	–6,91	3,88	1,356
	623	–8,04	4,73	1,553
	633	–9,16	5,71	1,742
	643	–10,29	6,86	1,926
	653	–11,42	8,20	2,104
	663	–12,55	9,74	2,277
	673	–13,69	11,55	2,446
	683	–14,82	13,59	2,609
	693	–15,95	15,94	2,769
	703	–17,09	18,61	2,924
	713	–18,24	21,71	3,078
	723	–19,41	25,24	3,228

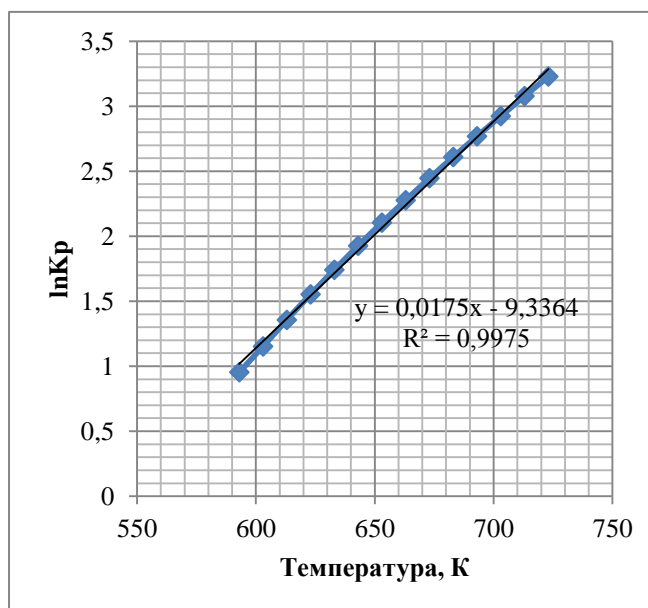


Рисунок Б.24 – Зависимость логарифма константы равновесия от температуры для реакции Бензол + Этан \leftrightarrow Толуол

Таблица Б.25 – Расчет параметров для реакции Гептан \leftrightarrow Тoluол + H₂

Химическая реакция	T, К	ΔG , кДж/моль	Kp	Ln(Kp)
Гептан \leftrightarrow Тoluол + H ₂	593	-13,62	15,84	2,762
	603	-18,08	36,82	3,606
	613	-22,56	83,64	4,426
	623	-27,03	184,66	5,218
	633	-31,49	397,22	5,984
	643	-35,97	835,91	6,728
	653	-40,44	1717,85	7,449
	663	-44,91	3454,42	8,147
	673	-49,38	6809,83	8,827
	683	-53,86	13160,3	9,485
	693	-58,33	24932,3	10,124
	703	-62,81	46463,0	10,746
	713	-67,31	85375,5	11,355
	723	-71,82	154439,0	11,947

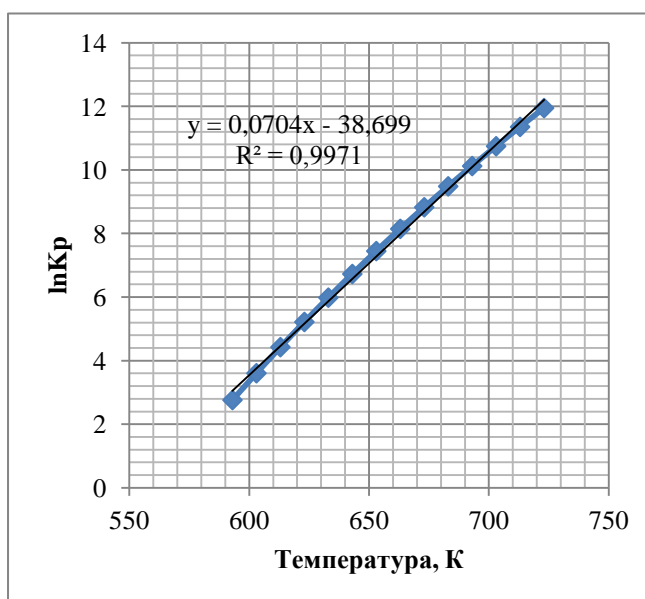


Рисунок Б.25 – Зависимость логарифма константы равновесия от температуры для реакции Гептан \leftrightarrow Тoluол + H₂

Приложение В

(рекомендуемое)

Расчеты на математической модели

Таблица В.1 – Расчет концентрации атомов водорода (м.д.) в молекулах каждого вещества в постоянном объеме реактора 0,57 м³ при различных температурах

Компонент	Температура, °С										
	335	345	355	365	375	385	395	405	415	425	435
23 – диметилбутан	0,71	0,71	0,71	0,71	0,71	0,71	0,71	0,71	0,71	0,70	0,70
3 – метилпентан	0,91	0,91	0,91	0,92	0,92	0,92	0,93	0,93	0,93	0,94	0,94
2 – метилпентан	1,92	1,92	1,93	1,93	1,93	1,94	1,94	1,94	1,95	1,95	1,96
22 – диметилбутан	1,84	1,82	1,81	1,80	1,78	1,77	1,76	1,74	1,73	1,72	1,71
Метилциклопентан	3,06	2,94	2,81	2,68	2,54	2,40	2,26	2,12	1,97	1,82	1,67
Циклогексан	0,47	0,44	0,42	0,39	0,37	0,34	0,32	0,30	0,27	0,25	0,23
н – Гексан	0,89	0,90	0,91	0,91	0,92	0,93	0,93	0,94	0,95	0,95	0,96
Водород	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,02	0,02	0,02	0,02
Бензол	0,75	0,79	0,83	0,88	0,92	0,97	1,01	1,06	1,11	1,15	1,20
Пропан	0,70	0,70	0,70	0,70	0,70	0,70	0,70	0,70	0,70	0,69	0,69
Метан	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Этан	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01
н – Бутан	0,52	0,52	0,52	0,52	0,52	0,52	0,52	0,52	0,52	0,52	0,52
Этилен	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Пропен	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,00	0,00	0,00	0,00
Бутен – 1	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01
Этилбензол	0,30	0,30	0,30	0,30	0,30	0,30	0,29	0,29	0,29	0,29	0,29
Пентен – 1	0,02	0,02	0,02	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01
н – Гептан	0,17	0,15	0,14	0,12	0,11	0,10	0,09	0,08	0,07	0,06	0,05
Толуол	0,51	0,52	0,52	0,53	0,54	0,54	0,55	0,55	0,56	0,56	0,56
2 – метилпентен	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Гексен – 1	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
3 – метилпентен	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Итого	12,80	12,68	12,56	12,44	12,32	12,19	12,06	11,94	11,80	11,67	11,54

Таблица В.2 – Расчет ОЧ продуктов, выхода бензиновой и газовой фракции в постоянном объеме реактора 0,57 м³ при различных температурах

Компонент	Температура, °С										
	335	345	355	365	375	385	395	405	415	425	435
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12

Продолжение таблицы В.2

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
Н ол, м.д.	0,03	0,03	0,03	0,03	0,03	0,03	0,03	0,03	0,03	0,03	0,03
Н ол, %	0,25	0,25	0,25	0,25	0,24	0,24	0,24	0,24	0,24	0,23	0,23
Н ар, м.д.	1,56	1,61	1,65	1,70	1,75	1,80	1,85	1,90	1,95	2,01	2,06
Н ар, %	12,17	12,66	13,16	13,69	14,23	14,78	15,36	15,95	16,56	17,18	17,82
Н общ, м.д.	12,80	12,68	12,56	12,44	12,32	12,19	12,06	11,94	11,80	11,67	11,54
Н общ, %	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0
ОЧИ	81,58	81,81	82,05	82,30	82,56	82,82	83,10	83,38	83,67	83,97	84,27
Выход бензина, м.д.	11,56	11,44	11,32	11,20	11,07	10,95	10,82	10,69	10,56	10,43	10,30
Выход бензина, %	90,27	90,17	90,07	89,97	89,87	89,77	89,67	89,57	89,47	89,37	89,27
Выход газа, м.д.	1,25	1,25	1,25	1,25	1,25	1,25	1,25	1,25	1,24	1,24	1,24
Выход газа, %	9,73	9,83	9,93	10,03	10,13	10,23	10,33	10,43	10,53	10,63	10,73

Таблица В.3 – Расчет расхода атомов водорода (кг/ч) в молекулах каждого вещества в постоянном объеме реактора 0,57 м³ при различных температурах

Компонент	Температура, °С										
	335	345	355	365	375	385	395	405	415	425	435
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
23 – диметилбутан	178,6	178,3	178,0	177,7	177,4	177,2	176,9	176,6	176,4	176,2	175,9
3 – метилпентан	227,2	227,9	228,7	229,5	230,2	231,0	231,8	232,6	233,4	234,3	235,1
2 – метилпентан	479,6	480,5	481,4	482,3	483,2	484,2	485,1	486,1	487,1	488,1	489,2
22 – диметилбутан	459,1	455,6	452,2	448,8	445,5	442,2	439,0	435,9	432,7	429,6	426,4
Метилциклопентан	446,2	428,2	409,5	390,4	370,7	350,5	329,9	308,9	287,5	265,9	243,9
Циклогексан	136,0	128,8	121,7	114,6	107,5	100,4	93,3	86,3	79,4	72,5	65,7
н – Гексан	223,7	225,3	226,9	228,5	230,2	231,8	233,4	235,1	236,8	238,6	240,4
Водород	37,4	39,5	41,7	43,9	46,1	48,4	50,7	53,0	55,3	57,6	60,0
Бензол	437,8	461,9	486,5	511,7	537,4	563,7	590,3	617,4	644,8	672,4	700,3
Пропан	307,0	307,4	307,7	307,7	307,6	307,2	306,7	306,0	305,1	304,0	302,7
Метан	1,3	1,2	1,2	1,2	1,2	1,1	1,1	1,1	1,1	1,1	1,0
Этан	5,9	5,8	5,8	5,7	5,7	5,6	5,6	5,6	5,5	5,5	5,5
н – Бутан	182,5	182,4	182,3	182,2	182,1	182,1	182,0	181,9	181,9	181,8	181,7
Этилен	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6
Пропен	3,3	3,3	3,2	3,1	3,1	3,0	2,9	2,9	2,8	2,8	2,7
Бутен – 1	4,5	4,4	4,3	4,2	4,1	4,0	3,9	3,9	3,8	3,7	3,7
Этилбензол	104,0	103,8	103,7	103,6	103,5	103,4	103,2	103,1	103,0	102,9	102,8
Пентен – 1	5,6	5,4	5,3	5,2	5,1	5,0	4,9	4,8	4,7	4,7	4,6
н – Гептан	36,7	33,4	30,2	27,3	24,5	21,9	19,5	17,2	15,2	13,2	11,4
Толуол	223,0	226,1	229,0	231,7	234,3	236,7	238,9	241,0	242,9	244,7	246,3
2 – метилпентен	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0

Продолжение таблицы В.3

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
Гексен – 1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3 – метилпентен	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Выход бензина, кг/ч	2966	2963	2961	2959	2957	2955	2953	2952	2951	2950	2949
Выход газа, кг/ч	534,0	536,4	538,7	540,7	542,7	544,5	546,1	547,5	548,8	549,9	550,9
ОЧ · ст. конверсии	69,1	69,3	69,4	69,6	69,8	69,9	70,1	70,3	70,5	70,8	71,0

Таблица В.4 – Расчет концентрации атомов водорода (м.д.) в молекулах каждого вещества в постоянном объеме реактора 1,13 м³ при различных температурах

Компонент	Температура, °C										
	335	345	355	365	375	385	395	405	415	425	435
23 – диметилбутан	0,63	0,62	0,62	0,62	0,62	0,62	0,62	0,62	0,61	0,61	0,61
3 – метилпентан	0,79	0,80	0,80	0,80	0,80	0,81	0,81	0,81	0,81	0,82	0,82
2 – метилпентан	1,68	1,68	1,68	1,68	1,69	1,69	1,69	1,69	1,70	1,70	1,70
22 – диметилбутан	1,61	1,60	1,59	1,57	1,56	1,55	1,53	1,52	1,51	1,50	1,48
Метилциклопентан	2,76	2,64	2,52	2,39	2,26	2,13	1,99	1,85	1,71	1,57	1,43
Циклогексан	0,42	0,40	0,38	0,35	0,33	0,31	0,28	0,26	0,24	0,21	0,19
н – Гексан	0,78	0,79	0,79	0,80	0,80	0,81	0,81	0,82	0,82	0,83	0,84
Водород	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,02	0,02	0,02
Бензол	0,79	0,83	0,88	0,92	0,96	1,01	1,05	1,10	1,15	1,19	1,24
Пропан	1,17	1,17	1,18	1,18	1,18	1,18	1,18	1,18	1,17	1,17	1,17
Метан	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Этан	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01
н – Бутан	0,53	0,53	0,53	0,53	0,53	0,53	0,53	0,53	0,53	0,53	0,53
Этилен	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Пропен	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01
Бутен – 1	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02
Этилбензол	0,32	0,32	0,32	0,31	0,31	0,31	0,31	0,31	0,31	0,31	0,31
Пентен – 1	0,03	0,03	0,03	0,03	0,03	0,03	0,03	0,03	0,02	0,02	0,02
н – Гептан	0,14	0,13	0,11	0,10	0,09	0,08	0,07	0,06	0,06	0,05	0,04
Толуол	0,52	0,53	0,53	0,54	0,55	0,55	0,55	0,56	0,56	0,56	0,57
2 – метилпентен	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Гексен – 1	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
3 – метилпентен	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Итого	12,24	12,12	12,00	11,88	11,76	11,64	11,51	11,39	11,26	11,14	11,01

Таблица В.5 – Расчет ОЧ продуктов, выхода бензиновой и газовой фракции в постоянном объеме реактора 1,13 м³ при различных температурах

Компонент	Температура, °С										
	335	345	355	365	375	385	395	405	415	425	435
Н ол, м.д.	0,06	0,06	0,06	0,06	0,05	0,05	0,05	0,05	0,05	0,05	0,05
Н ол, %	0,48	0,47	0,47	0,46	0,46	0,45	0,45	0,45	0,44	0,44	0,44
Н ар, м.д.	1,63	1,68	1,73	1,77	1,82	1,87	1,92	1,97	2,02	2,07	2,12
Н ар, %	13,33	13,85	14,38	14,93	15,50	16,08	16,68	17,30	17,93	18,57	19,23
Н общ, м.д.	12,24	12,12	12,00	11,88	11,76	11,64	11,51	11,39	11,26	11,14	11,01
Н общ, %	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0
ОЧИ	82,37	82,61	82,86	83,12	83,39	83,66	83,95	84,24	84,54	84,85	85,16
Выход бензина, м.д.	10,51	10,39	10,27	10,15	10,02	9,90	9,78	9,65	9,53	9,41	9,29
Выход бензина, %	85,89	85,72	85,56	85,40	85,24	85,08	84,92	84,77	84,62	84,47	84,32
Выход газа, м.д.	1,73	1,73	1,73	1,74	1,74	1,74	1,74	1,73	1,73	1,73	1,73
Выход газа, %	14,11	14,28	14,44	14,60	14,76	14,92	15,08	15,23	15,38	15,53	15,68

Таблица В.6 – Расчет расхода атомов водорода (кг/ч) в молекулах каждого вещества в постоянном объеме реактора 1,13 м³ при различных температурах

Компонент	Температура, °С										
	335	345	355	365	375	385	395	405	415	425	435
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
23 – диметилбутан	156,5	156,1	155,7	155,3	154,9	154,6	154,2	153,9	153,6	153,3	153,0
3 – метилпентан	198,5	199,0	199,6	200,1	200,7	201,3	201,9	202,5	203,1	203,8	204,5
2 – метилпентан	419,5	419,9	420,4	420,9	421,5	422,0	422,6	423,3	423,9	424,6	425,4
22 – диметилбутан	403,7	400,0	396,5	393,1	389,7	386,5	383,3	380,1	377,0	373,9	370,8
Метилциклопентан	403,2	385,4	367,1	348,4	329,4	310,0	290,3	270,2	250,0	229,6	209,2
Циклогексан	123,8	116,7	109,7	102,8	95,9	89,1	82,4	75,7	69,2	62,7	56,3
н – Гексан	195,1	196,4	197,7	199,1	200,4	201,8	203,2	204,6	206,0	207,5	209,1
Водород	35,0	37,1	39,2	41,4	43,6	45,8	48,0	50,3	52,6	54,9	57,2
Бензол	461,9	486,2	511,0	536,3	562,0	588,1	614,6	641,5	668,5	695,8	723,2
Пропан	511,6	513,1	514,3	515,0	515,4	515,5	515,2	514,6	513,7	512,5	510,9
Метан	2,3	2,3	2,2	2,2	2,1	2,1	2,1	2,0	2,0	1,9	1,9
Этан	7,9	7,8	7,7	7,6	7,5	7,4	7,3	7,3	7,2	7,1	7,1
н – Бутан	186,1	186,0	185,8	185,7	185,5	185,4	185,3	185,2	185,0	184,9	184,8
Этилен	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6
Пропен	6,0	5,9	5,8	5,7	5,5	5,4	5,3	5,2	5,2	5,1	5,0
Бутен – 1	8,1	8,0	7,8	7,6	7,5	7,3	7,2	7,0	6,9	6,8	6,7
Этилбензол	110,9	110,7	110,4	110,2	109,9	109,7	109,5	109,2	109,0	108,8	108,6
Пентен – 1	10,2	9,9	9,7	9,5	9,3	9,2	9,0	8,8	8,6	8,5	8,3

Продолжение таблицы В.6

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
н – Гептан	30,4	27,5	24,8	22,3	19,9	17,8	15,7	13,8	12,1	10,5	9,0
Толуол	228,9	231,5	234,0	236,3	238,5	240,5	242,3	244,1	245,7	247,2	248,5
2 – метилпентен	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Гексен – 1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3 – метилпентен	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Выход бензина, кг/ч	2757	2753	2750	2748	2745	2743	2742	2740	2739	2738	2738
Выход газа, кг/ч	742,8	746,2	749,2	751,8	754,2	756,2	757,9	759,4	760,5	761,4	762,0
ОЧ · ст. конверсии	64,9	65,0	65,1	65,3	65,4	65,6	65,8	66,0	66,2	66,4	66,6

Таблица В.7 – Расчет концентрации атомов водорода (м.д.) в молекулах каждого вещества в постоянном объеме реактора 1,70 м³ при различных температурах

Компонент	Температура, °C										
	335	345	355	365	375	385	395	405	415	425	435
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
23 – диметилбутан	0,57	0,55	0,55	0,55	0,55	0,55	0,54	0,54	0,54	0,54	0,54
3 – метилпентан	0,72	0,70	0,71	0,71	0,71	0,71	0,71	0,71	0,72	0,72	0,72
2 – метилпентан	1,51	1,49	1,49	1,49	1,49	1,49	1,49	1,49	1,49	1,49	1,50
22 – диметилбутан	1,46	1,42	1,41	1,39	1,38	1,37	1,35	1,34	1,33	1,32	1,30
Метилциклопентан	2,55	2,40	2,28	2,15	2,03	1,90	1,77	1,64	1,50	1,37	1,24
Циклогексан	0,39	0,37	0,34	0,32	0,30	0,27	0,25	0,23	0,21	0,19	0,17
н – Гексан	0,70	0,69	0,70	0,70	0,71	0,71	0,72	0,72	0,73	0,73	0,74
Водород	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,02	0,02
Бензол	0,82	0,87	0,91	0,95	1,00	1,04	1,09	1,13	1,18	1,22	1,27
Пропан	1,49	1,55	1,55	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,56	1,55	1,55
Метан	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Этан	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,01	0,01	0,01	0,01
н – Бутан	0,54	0,54	0,54	0,54	0,54	0,54	0,54	0,54	0,54	0,54	0,54
Этилен	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Пропен	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01
Бутен – 1	0,02	0,03	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02
Этилбензол	0,33	0,33	0,33	0,33	0,33	0,33	0,33	0,33	0,33	0,33	0,32
Пентен – 1	0,04	0,04	0,04	0,04	0,04	0,04	0,04	0,03	0,03	0,03	0,03
н – Гептан	0,12	0,11	0,10	0,09	0,08	0,07	0,06	0,05	0,05	0,04	0,03
Толуол	0,53	0,54	0,54	0,55	0,55	0,56	0,56	0,56	0,57	0,57	0,57
2 – метилпентен	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Гексен – 1	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00

Продолжение таблицы В.7

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
3 – метилпентен	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Итого	11,85	11,67	11,55	11,43	11,31	11,19	11,07	10,95	10,83	10,71	10,59

Таблица В.8 – Расчет ОЧ продуктов, выхода бензиновой и газовой фракции в постоянном объеме реактора 1,70 м³ при различных температурах

Компонент	Температура, °С										
	335	345	355	365	375	385	395	405	415	425	435
Н ол, м.д.	0,08	0,08	0,08	0,08	0,07	0,07	0,07	0,07	0,07	0,07	0,07
Н ол, %	0,66	0,68	0,67	0,66	0,66	0,65	0,65	0,64	0,64	0,63	0,63
Н ар, м.д.	1,68	1,74	1,78	1,83	1,88	1,93	1,97	2,02	2,07	2,12	2,17
Н ар, %	14,21	14,89	15,45	16,02	16,61	17,22	17,84	18,47	19,12	19,79	20,46
Н общ, м.д.	11,85	11,67	11,55	11,43	11,31	11,19	11,07	10,95	10,83	10,71	10,59
Н общ, %	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0
ОЧИ	82,97	83,32	83,58	83,85	84,13	84,41	84,70	85,00	85,31	85,62	85,95
Выход бензина, м.д.	9,79	9,55	9,43	9,31	9,18	9,06	8,94	8,82	8,70	8,58	8,47
Выход бензина, %	82,64	81,86	81,64	81,41	81,19	80,98	80,77	80,56	80,36	80,16	79,97
Выход газа, м.д.	2,06	2,12	2,12	2,12	2,13	2,13	2,13	2,13	2,13	2,12	2,12
Выход газа, %	17,36	18,14	18,36	18,59	18,81	19,02	19,23	19,44	19,64	19,84	20,03

Таблица В.9 – Расчет расхода атомов водорода (кг/ч) в молекулах каждого вещества в постоянном объеме реактора 1,70 м³ при различных температурах

Компонент	Температура, °С										
	335	345	355	365	375	385	395	405	415	425	435
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
23 – диметилбутан	141,4	138,4	137,9	137,4	136,9	136,5	136,0	135,6	135,2	134,8	134,4
3 – метилпентан	179,1	176,2	176,5	176,9	177,2	177,6	178,0	178,4	178,8	179,3	179,8
2 – метилпентан	378,6	372,0	372,1	372,1	372,3	372,4	372,6	372,9	373,2	373,6	374,0
22 – диметилбутан	365,7	355,7	352,0	348,5	345,0	341,7	338,4	335,2	332,0	328,9	325,8
Метилциклопентан	372,6	349,9	332,1	313,8	295,3	276,7	257,8	238,7	219,5	200,2	181,1
Циклогексан	114,9	106,5	99,7	92,9	86,3	79,8	73,3	67,0	60,7	54,7	48,7
н – Гексан	175,7	173,7	174,7	175,7	176,8	177,9	179,0	180,2	181,4	182,6	183,9
Водород	33,3	35,1	37,2	39,3	41,5	43,6	45,9	48,1	50,4	52,6	54,9
Бензол	478,4	505,6	530,5	555,8	581,5	607,4	633,8	660,3	687,1	714,0	740,8
Пропан	651,2	676,5	678,7	680,4	681,5	682,2	682,4	682,1	681,4	680,3	678,7
Метан	3,1	3,2	3,1	3,0	3,0	2,9	2,8	2,8	2,7	2,7	2,6
Этан	9,3	9,4	9,3	9,2	9,1	8,9	8,8	8,7	8,6	8,5	8,5
н – Бутан	188,8	189,0	188,8	188,7	188,5	188,3	188,1	187,9	187,8	187,6	187,5
Этилен	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5

Продолжение таблицы В.9

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
Пропен	7,9	8,0	7,9	7,8	7,6	7,5	7,4	7,2	7,1	7,0	6,9
Бутен – 1	10,8	11,0	10,8	10,6	10,4	10,2	10,0	9,8	9,6	9,4	9,3
Этилбензол	116,1	116,6	116,2	115,9	115,5	115,2	114,9	114,6	114,3	113,9	113,6
Пентен – 1	13,6	13,8	13,5	13,2	13,0	12,7	12,5	12,2	12,0	11,8	11,6
н – Гептан	26,3	23,2	20,8	18,7	16,6	14,7	13,0	11,4	9,9	8,5	7,2
Толуол	232,6	235,5	237,6	239,7	241,5	243,3	244,9	246,4	247,7	249,0	250,1
2 – метилпентен	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Гексен – 1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3 – метилпентен	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Выход бензина, кг/ч	2614	2586	2582	2579	2576	2574	2571	2570	2569	2568	2567
Выход газа, кг/ч	885,7	913,2	917,1	920,5	923,5	926,0	928,1	929,7	931,0	931,8	932,2
ОЧ · ст. конверсии	62,0	61,6	61,7	61,8	61,9	62,1	62,2	62,4	62,6	62,8	63,1

Таблица В.10 – Расчет концентрации атомов водорода (м.д.) в молекулах каждого вещества в постоянном объеме реактора 2,26 м³ при различных температурах

Компонент	Температура, °C										
	335	345	355	365	375	385	395	405	415	425	435
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
23 – диметилбутан	0,50	0,50	0,49	0,49	0,49	0,49	0,48	0,48	0,48	0,48	0,48
3 – метилпентан	0,63	0,63	0,63	0,63	0,63	0,63	0,63	0,63	0,64	0,64	0,64
2 – метилпентан	1,33	1,33	1,33	1,33	1,33	1,33	1,33	1,33	1,33	1,33	1,33
22 – диметилбутан	1,29	1,28	1,26	1,25	1,23	1,22	1,21	1,19	1,18	1,17	1,15
Метилциклопентан	2,31	2,19	2,07	1,95	1,83	1,71	1,58	1,46	1,33	1,21	1,08
Циклогексан	0,36	0,34	0,31	0,29	0,27	0,25	0,23	0,20	0,18	0,16	0,15
н – Гексан	0,62	0,62	0,62	0,63	0,63	0,63	0,64	0,64	0,64	0,65	0,65
Водород	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,02
Бензол	0,85	0,89	0,94	0,98	1,02	1,07	1,11	1,16	1,20	1,25	1,29
Пропан	1,84	1,85	1,86	1,86	1,87	1,87	1,87	1,87	1,87	1,87	1,87
Метан	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Этан	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02
н – Бутан	0,55	0,55	0,55	0,55	0,55	0,55	0,54	0,54	0,54	0,54	0,54
Этилен	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Пропен	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,01	0,01
Бутен – 1	0,03	0,03	0,03	0,03	0,03	0,03	0,03	0,03	0,03	0,03	0,03
Этилбензол	0,35	0,35	0,35	0,35	0,34	0,34	0,34	0,34	0,34	0,34	0,34
Пентен – 1	0,05	0,05	0,05	0,05	0,05	0,05	0,04	0,04	0,04	0,04	0,04

Продолжение таблицы В.10

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
н – Гептан	0,10	0,09	0,08	0,07	0,06	0,06	0,05	0,04	0,04	0,03	0,03
Толуол	0,54	0,55	0,55	0,55	0,56	0,56	0,56	0,57	0,57	0,57	0,57
2 – метилпентен	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Гексен – 1	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
3 – метилпентен	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Итого	11,41	11,29	11,18	11,06	10,94	10,82	10,70	10,58	10,47	10,35	10,24

Таблица В.11 – Расчет ОЧ продуктов, выхода бензиновой и газовой фракции в постоянном объеме реактора 2,26 м³ при различных температурах

Компонент	Температура, °С										
	335	345	355	365	375	385	395	405	415	425	435
Н ол, м.д.	0,10	0,10	0,10	0,09	0,09	0,09	0,09	0,09	0,09	0,08	0,08
Н ол, %	0,88	0,87	0,86	0,85	0,84	0,83	0,83	0,82	0,82	0,81	0,81
Н ар, м.д.	1,74	1,79	1,83	1,88	1,93	1,97	2,02	2,07	2,11	2,16	2,21
Н ар, %	15,26	15,82	16,40	16,99	17,60	18,22	18,86	19,51	20,18	20,86	21,55
Н общ, м.д.	11,41	11,29	11,18	11,06	10,94	10,82	10,70	10,58	10,47	10,35	10,24
Н общ, %	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0
ОЧИ	83,70	83,96	84,23	84,50	84,79	85,08	85,38	85,69	86,00	86,32	86,65
Выход бензина, м.д.	8,99	8,86	8,74	8,61	8,49	8,37	8,25	8,13	8,02	7,90	7,79
Выход бензина, %	78,76	78,47	78,18	77,89	77,62	77,35	77,09	76,83	76,58	76,34	76,11
Выход газа, м.д.	2,42	2,43	2,44	2,44	2,45	2,45	2,45	2,45	2,45	2,45	2,45
Выход газа, %	21,24	21,53	21,82	22,11	22,38	22,65	22,91	23,17	23,42	23,66	23,89

Таблица В.12 – Расчет расхода атомов водорода (кг/ч) в молекулах каждого вещества в постоянном объеме реактора 2,260 м³ при различных температурах

Компонент	Температура, °С										
	335	345	355	365	375	385	395	405	415	425	435
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
23 – диметилбутан	124,8	124,1	123,4	122,8	122,2	121,6	121,1	120,6	120,1	119,6	119,1
3 – метилпентан	157,6	157,7	157,8	157,9	158,0	158,2	158,4	158,6	158,8	159,1	159,4
2 – метилпентан	333,5	333,1	332,7	332,3	332,0	331,8	331,6	331,5	331,5	331,5	331,5
22 – диметилбутан	323,4	319,4	315,6	311,8	308,3	304,8	301,4	298,1	294,9	291,7	288,5
Метилциклопентан	337,1	319,9	302,4	284,6	266,7	248,7	230,6	212,4	194,2	176,0	158,0
Циклогексан	104,6	97,8	91,1	84,5	78,1	71,8	65,7	59,6	53,7	48,0	42,5
н – Гексан	154,5	155,2	156,0	156,8	157,6	158,4	159,3	160,2	161,1	162,1	163,1
Водород	31,4	33,4	35,5	37,6	39,7	41,9	44,0	46,3	48,5	50,7	53,0
Бензол	496,9	521,4	546,3	571,7	597,3	623,1	649,2	675,5	701,9	728,4	754,8

Продолжение таблицы В.12

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
Пропан	806,3	810,1	813,3	815,9	817,8	819,1	819,8	819,9	819,5	818,6	817,0
Метан	4,0	3,9	3,8	3,8	3,7	3,6	3,5	3,5	3,4	3,4	3,3
Этан	11,0	10,9	10,7	10,5	10,4	10,3	10,1	10,0	9,9	9,8	9,7
н – Бутан	192,0	191,7	191,5	191,2	191,0	190,8	190,6	190,4	190,1	189,9	189,8
Этилен	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4	0,5	0,5
Пропен	10,0	9,8	9,7	9,5	9,4	9,2	9,1	8,9	8,8	8,6	8,5
Бутен – 1	14,1	13,7	13,4	13,2	12,9	12,6	12,4	12,2	11,9	11,7	11,5
Этилбензол	122,2	121,7	121,3	120,8	120,4	120,0	119,6	119,2	118,8	118,4	118,0
Пентен – 1	17,6	17,2	16,8	16,5	16,1	15,8	15,5	15,2	14,9	14,6	14,4
н – Гептан	22,1	19,9	17,8	15,9	14,1	12,4	10,9	9,5	8,2	7,0	5,9
Толуол	236,5	238,5	240,4	242,2	243,9	245,4	246,8	248,1	249,3	250,4	251,4
2 – метилпентен	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Гексен – 1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3 – метилпентен	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Выход бензина, кг/ч	2455	2449	2445	2441	2437	2434	2431	2429	2428	2427	2427
Выход газа, кг/ч	1044	1050	1054	1059	1062	1065	1068	1070	1071	1072	1072
ОЧ · ст. конверсии	58,7	58,8	58,8	58,9	59,0	59,2	59,3	59,5	59,7	59,9	60,1

Таблица В.13 – Расчет концентрации атомов водорода (м.д.) в молекулах каждого вещества при постоянной температуре 335°C и при различных объемах реактора

Компонент	Объем реактора, м ³					
	0,57	1,13	1,70	2,26	2,83	3,39
1	2	3	4	5	6	7
23 – диметилбутан	0,71	0,63	0,57	0,50	0,45	0,41
3 – метилпентан	0,91	0,79	0,72	0,63	0,57	0,52
2 – метилпентан	1,92	1,68	1,51	1,33	1,21	1,10
22 – диметилбутан	1,84	1,61	1,46	1,29	1,17	1,07
Метилциклопентан	3,06	2,76	2,55	2,31	2,13	1,97
Циклогексан	0,47	0,42	0,39	0,36	0,33	0,31
н – Гексан	0,89	0,78	0,70	0,62	0,56	0,51
Водород	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01
Бензол	0,75	0,79	0,82	0,85	0,87	0,89
Пропан	0,70	1,17	1,49	1,84	2,10	2,31
Метан	0,00	0,00	0,00	0,00	0,01	0,01
Этан	0,01	0,01	0,02	0,02	0,02	0,02

Продолжение таблицы В.13

1	2	3	4	5	6	7
н – Бутан	0,52	0,53	0,54	0,55	0,56	0,56
Этилен	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Пропен	0,01	0,01	0,01	0,02	0,02	0,02
Бутен – 1	0,01	0,02	0,02	0,03	0,04	0,04
Этилбензол	0,30	0,32	0,33	0,35	0,36	0,37
Пентен – 1	0,02	0,03	0,04	0,05	0,06	0,07
н – Гептан	0,17	0,14	0,12	0,10	0,09	0,08
Толуол	0,51	0,52	0,53	0,54	0,55	0,55
2 – метилпентен	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Гексен – 1	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
3 – метилпентен	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Итого	12,80	12,24	11,85	11,41	11,10	10,83

Таблица В.14 – Расчет ОЧ продуктов, выхода бензиновой и газовой фракции при постоянной температуре 335°C и при различных объемах реактора

Компонент	Объем реактора, м ³					
	0,57	1,13	1,70	2,26	2,83	3,39
Н ол, м.д.	0,03	0,06	0,08	0,10	0,12	0,13
Н ол, %	0,25	0,48	0,66	0,88	1,05	1,22
Н ар, м.д.	1,56	1,63	1,68	1,74	1,78	1,82
Н ар, %	12,17	13,33	14,21	15,26	16,07	16,80
Н общ, м.д.	12,80	12,24	11,85	11,41	11,10	10,83
Н общ, %	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0
ОЧИ	81,58	82,37	82,97	83,70	84,27	84,79
Выход бензина, м.д.	11,56	10,51	9,79	8,99	8,41	7,92
Выход бензина, %	90,27	85,89	82,64	78,76	75,79	73,13
Выход газа, м.д.	1,25	1,73	2,06	2,42	2,69	2,91
Выход газа, %	9,73	14,11	17,36	21,24	24,21	26,87

Таблица В.15 – Расчет расхода атомов водорода (кг/ч) в молекулах каждого вещества постоянной температуре 335°C и при различных объемах реактора

Компонент	Объем реактора, м ³					
	0,57	1,13	1,70	2,26	2,83	3,39
1	2	3	4	5	6	7
23 – диметилбутан	178,6	156,5	141,4	124,8	112,9	102,9

Продолжение таблицы В.15

1	2	3	4	5	6	7
3 – метилпентан	227,2	198,5	179,1	157,6	142,5	129,7
2 – метилпентан	479,6	419,5	378,6	333,5	301,6	274,6
22 – диметилбутан	459,1	403,7	365,7	323,4	293,2	267,6
Метилциклопентан	446,2	403,2	372,6	337,1	310,9	287,8
Циклогексан	136,0	123,8	114,9	104,6	96,8	89,9
н – Гексан	223,7	195,1	175,7	154,5	139,5	126,8
Водород	37,4	35,0	33,3	31,4	30,1	28,9
Бензол	437,8	461,9	478,4	496,9	510,1	521,4
Пропан	307,0	511,6	651,2	806,3	916,8	1010,7
Метан	1,3	2,3	3,1	4,0	4,7	5,4
Этан	5,9	7,9	9,3	11,0	12,3	13,5
н – Бутан	182,5	186,1	188,8	192,0	194,4	196,6
Этилен	0,6	0,6	0,5	0,4	0,4	0,4
Пропен	3,3	6,0	7,9	10,0	11,5	12,6
Бутен – 1	4,5	8,1	10,8	14,1	16,5	18,7
Этилбензол	104,0	110,9	116,1	122,2	126,8	130,9
Пентен – 1	5,6	10,2	13,6	17,6	20,7	23,4
н – Гептан	36,7	30,4	26,3	22,1	19,3	17,0
Толуол	223,0	228,9	232,6	236,5	239,1	241,2
2 – метилпентен	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Гексен – 1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3 – метилпентен	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Выход бензина, кг/ч	2966,0	2757,1	2614,3	2455,2	2341,6	2244,9
Выход газа, кг/ч	534,0	742,8	885,7	1044,7	1158,4	1255,1
ОЧ · ст. конверсии	69,1	64,9	62,0	58,7	56,4	54,4

Таблица В.16 – Расчет концентрации атомов водорода (м.д.) в молекулах каждого вещества при постоянной температуре 345°C и при различных объемах реактора

Компонент	Объем реактора, м ³					
	0,57	1,13	1,70	2,26	2,83	3,39
1	2	3	4	5	6	7
23 – диметилбутан	0,71	0,62	0,55	0,50	0,45	0,41
3 – метилпентан	0,91	0,80	0,70	0,63	0,57	0,52

Продолжение таблицы В.16

1	2	3	4	5	6	7
2 – метилпентан	1,92	1,68	1,49	1,33	1,20	1,09
22 – диметилбутан	1,82	1,60	1,42	1,28	1,16	1,05
Метилциклопентан	2,94	2,64	2,40	2,19	2,02	1,86
Циклогексан	0,44	0,40	0,37	0,34	0,31	0,29
н – Гексан	0,90	0,79	0,69	0,62	0,56	0,51
Водород	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01
Бензол	0,79	0,83	0,87	0,89	0,92	0,94
Пропан	0,70	1,17	1,55	1,85	2,11	2,32
Метан	0,00	0,00	0,00	0,00	0,01	0,01
Этан	0,01	0,01	0,02	0,02	0,02	0,02
н – Бутан	0,52	0,53	0,54	0,55	0,55	0,56
Этилен	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Пропен	0,01	0,01	0,01	0,02	0,02	0,02
Бутен – 1	0,01	0,02	0,03	0,03	0,04	0,04
Этилбензол	0,30	0,32	0,33	0,35	0,36	0,37
Пентен – 1	0,02	0,03	0,04	0,05	0,06	0,07
н – Гептан	0,15	0,13	0,11	0,09	0,08	0,07
Толуол	0,52	0,53	0,54	0,55	0,55	0,56
2 – метилпентен	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Гексен – 1	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
3 – метилпентен	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Итого	12,68	12,12	11,67	11,29	10,98	10,71

Таблица В.17 – Расчет ОЧ продуктов, выхода бензиновой и газовой фракции при постоянной температуре 345°C и при различных объемах реактора

Компонент	Объем реактора, м ³					
	0,57	1,13	1,70	2,26	2,83	3,39
1	2	3	4	5	6	7
Н ол, м.д.	0,03	0,06	0,08	0,10	0,11	0,13
Н ол, %	0,25	0,47	0,68	0,87	1,04	1,20
Н ар, м.д.	1,61	1,68	1,74	1,79	1,83	1,86
Н ар, %	12,66	13,85	14,89	15,82	16,65	17,40
Н общ, м.д.	12,68	12,12	11,67	11,29	10,98	10,71
Н общ, %	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0
ОЧИ	81,81	82,61	83,32	83,96	84,53	85,06

Продолжение таблицы В.17

1	2	3	4	5	6	7
Выход бензина, м.д.	11,44	10,39	9,55	8,86	8,28	7,79
Выход бензина, %	90,17	85,72	81,86	78,47	75,44	72,72
Выход газа, м.д.	1,25	1,73	2,12	2,43	2,70	2,92
Выход газа, %	9,83	14,28	18,14	21,53	24,56	27,28

Таблица В.18 – Расчет расхода атомов водорода (кг/ч) в молекулах каждого вещества постоянной температуре 345°C и при различных объемах реактора

Компонент	Объем реактора, м ³					
	0,57	1,13	1,70	2,26	2,83	3,39
23 – диметилбутан	178,3	156,1	138,4	124,1	112,1	102,0
3 – метилпентан	227,9	199,0	176,2	157,7	142,3	129,3
2 – метилпентан	480,5	419,9	372,0	333,1	300,7	273,3
22 – диметилбутан	455,6	400,0	355,7	319,4	289,1	263,3
Метилциклопентан	428,2	385,4	349,9	319,9	293,9	271,2
Циклогексан	128,8	116,7	106,5	97,8	90,2	83,4
н – Гексан	225,3	196,4	173,7	155,2	140,0	127,1
Водород	39,5	37,1	35,1	33,4	32,0	30,8
Бензол	461,9	486,2	505,6	521,4	534,7	545,9
Пропан	307,4	513,1	676,5	810,1	921,7	1016,5
Метан	1,2	2,3	3,2	3,9	4,6	5,2
Этан	5,8	7,8	9,4	10,9	12,1	13,3
н – Бутан	182,4	186,0	189,0	191,7	194,1	196,2
Этилен	0,6	0,6	0,5	0,4	0,4	0,4
Пропен	3,3	5,9	8,0	9,8	11,3	12,5
Бутен – 1	4,4	8,0	11,0	13,7	16,1	18,3
Этилбензол	103,8	110,7	116,6	121,7	126,3	130,3
Пентен – 1	5,4	9,9	13,8	17,2	20,2	22,9
н – Гептан	33,4	27,5	23,2	19,9	17,3	15,2
Толуол	226,1	231,5	235,5	238,5	240,9	242,9
2 – метилпентен	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Гексен – 1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3 – метилпентен	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Выход бензина, кг/ч	2963,6	2753,8	2586,8	2449,9	2335,3	2237,9
Выход газа, кг/ч	536,4	746,2	913,2	1050,1	1164,6	1262,1
ОЧ · ст. конверсии	69,3	65,0	61,6	58,8	56,4	54,4

Таблица В.19 – Расчет концентрации атомов водорода (м.д.) в молекулах каждого вещества при постоянной температуре 355°C и при различных объемах реактора

Компонент	Объем реактора, м ³					
	0,57	1,13	1,70	2,26	2,83	3,39
23 – диметилбутан	0,71	0,62	0,55	0,49	0,45	0,40
3 – метилпентан	0,91	0,80	0,71	0,63	0,57	0,52
2 – метилпентан	1,93	1,68	1,49	1,33	1,20	1,09
22 – диметилбутан	1,81	1,59	1,41	1,26	1,14	1,04
Метилциклопентан	2,81	2,52	2,28	2,07	1,90	1,75
Циклогексан	0,42	0,38	0,34	0,31	0,29	0,26
н – Гексан	0,91	0,79	0,70	0,62	0,56	0,51
Водород	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01
Бензол	0,83	0,88	0,91	0,94	0,96	0,98
Пропан	0,70	1,18	1,55	1,86	2,12	2,33
Метан	0,00	0,00	0,00	0,00	0,01	0,01
Этан	0,01	0,01	0,02	0,02	0,02	0,02
н – Бутан	0,52	0,53	0,54	0,55	0,55	0,56
Этилен	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Пропен	0,01	0,01	0,01	0,02	0,02	0,02
Бутен – 1	0,01	0,02	0,02	0,03	0,04	0,04
Этилбензол	0,30	0,32	0,33	0,35	0,36	0,37
Пентен – 1	0,02	0,03	0,04	0,05	0,06	0,06
н – Гептан	0,14	0,11	0,10	0,08	0,07	0,06
Толуол	0,52	0,53	0,54	0,55	0,55	0,56
2 – метилпентен	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Гексен – 1	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
3 – метилпентен	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Итого	12,56	12,00	11,55	11,18	10,86	10,59

Таблица В.20 – Расчет ОЧ продуктов, выхода бензиновой и газовой фракции при постоянной температуре 355°C и при различных объемах реактора

Компонент	Объем реактора, м ³					
	0,57	1,13	1,70	2,26	2,83	3,39
Н ол, м.д.	0,03	0,06	0,08	0,10	0,11	0,13
Н ол, %	0,25	0,47	0,67	0,86	1,03	1,19
Н ар, м.д.	1,65	1,73	1,78	1,83	1,87	1,91
Н ар, %	13,16	14,38	15,45	16,40	17,25	18,01
Н общ, м.д.	12,56	12,00	11,55	11,18	10,86	10,59
Н общ, %	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0
ОЧИ	82,05	82,86	83,58	84,23	84,81	85,34
Выход бензина, м.д.	11,32	10,27	9,43	8,74	8,16	7,66
Выход бензина, %	90,07	85,56	81,64	78,18	75,09	72,32
Выход газа, м.д.	1,25	1,73	2,12	2,44	2,71	2,93
Выход газа, %	9,93	14,44	18,36	21,82	24,91	27,68

Таблица В.21 – Расчет расхода атомов водорода (кг/ч) в молекулах каждого вещества постоянной температуре 355°C и при различных объемах реактора

Компонент	Объем реактора, м ³					
	0,57	1,13	1,70	2,26	2,83	3,39
1	2	3	4	5	6	7
23 – диметилбутан	178,0	155,7	137,9	123,4	111,3	101,1
3 – метилпентан	228,7	199,6	176,5	157,8	142,2	129,0
2 – метилпентан	481,4	420,4	372,1	332,7	299,9	272,2
22 – диметилбутан	452,2	396,5	352,0	315,6	285,0	259,1
Метилциклопентан	409,5	367,1	332,1	302,4	276,8	254,5
Циклогексан	121,7	109,7	99,7	91,1	83,6	77,1
н – Гексан	226,9	197,7	174,7	156,0	140,5	127,4
Водород	41,7	39,2	37,2	35,5	34,1	32,8
Бензол	486,5	511,0	530,5	546,3	559,6	570,8
Пропан	307,7	514,3	678,7	813,3	925,8	1021,4
Метан	1,2	2,2	3,1	3,8	4,5	5,1
Этан	5,8	7,7	9,3	10,7	12,0	13,1
н – Бутан	182,3	185,8	188,8	191,5	193,8	195,9
Этилен	0,6	0,6	0,5	0,4	0,4	0,4
Пропен	3,2	5,8	7,9	9,7	11,1	12,4

Продолжение таблицы В.21

1	2	3	4	5	6	7
Бутен – 1	4,3	7,8	10,8	13,4	15,8	17,9
Этилбензол	103,7	110,4	116,2	121,3	125,7	129,7
Пентен – 1	5,3	9,7	13,5	16,8	19,7	22,4
н – Гептан	30,2	24,8	20,8	17,8	15,4	13,5
Толуол	229,0	234,0	237,6	240,4	242,6	244,4
2 – метилпентен	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Гексен – 1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3 – метилпентен	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Выход бензина, кг/ч	2961,3	2750,8	2582,9	2445,1	2329,8	2231,7
Выход газа, кг/ч	538,7	749,2	917,1	1054,8	1170,2	1268,3
ОЧ · ст. конверсии	69,4	65,1	61,7	58,8	56,5	54,4

Таблица В.22 – Расчет концентрации атомов водорода (м.д.) в молекулах каждого вещества при постоянной температуре 365°C и при различных объемах реактора

Компонент	Объем реактора, м ³					
	0,57	1,13	1,70	2,26	2,83	3,39
1	2	3	4	5	6	7
23 – диметилбутан	0,71	0,62	0,55	0,49	0,44	0,40
3 – метилпентан	0,92	0,80	0,71	0,63	0,57	0,51
2 – метилпентан	1,93	1,68	1,49	1,33	1,20	1,08
22 – диметилбутан	1,80	1,57	1,39	1,25	1,12	1,02
Метилциклопентан	2,68	2,39	2,15	1,95	1,78	1,63
Циклогексан	0,39	0,35	0,32	0,29	0,26	0,24
н – Гексан	0,91	0,80	0,70	0,63	0,56	0,51
Водород	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01
Бензол	0,88	0,92	0,95	0,98	1,00	1,02
Пропан	0,70	1,18	1,56	1,86	2,12	2,34
Метан	0,00	0,00	0,00	0,00	0,01	0,01
Этан	0,01	0,01	0,02	0,02	0,02	0,02
н – Бутан	0,52	0,53	0,54	0,55	0,55	0,56
Этилен	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Пропен	0,01	0,01	0,01	0,02	0,02	0,02
Бутен – 1	0,01	0,02	0,02	0,03	0,04	0,04

Продолжение таблицы В.22

1	2	3	4	5	6	7
Этилбензол	0,30	0,31	0,33	0,35	0,36	0,37
Пентен – 1	0,01	0,03	0,04	0,05	0,06	0,06
н – Гептан	0,12	0,10	0,09	0,07	0,06	0,05
Толуол	0,53	0,54	0,55	0,55	0,56	0,56
2 – метилпентен	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Гексен – 1	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
3 – метилпентен	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Итого	12,44	11,88	11,43	11,06	10,74	10,48

Таблица В.23 – Расчет ОЧ продуктов, выхода бензиновой и газовой фракции при постоянной температуре 365°C и при различных объемах реактора

Компонент	Объем реактора, м ³					
	0,57	1,13	1,70	2,26	2,83	3,39
Н ол, м.д.	0,03	0,06	0,08	0,09	0,11	0,12
Н ол, %	0,25	0,46	0,66	0,85	1,02	1,18
Н ар, м.д.	1,70	1,77	1,83	1,88	1,92	1,95
Н ар, %	13,69	14,93	16,02	16,99	17,86	18,64
Н общ, м.д.	12,44	11,88	11,43	11,06	10,74	10,48
Н общ, %	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0
ОЧИ	82,30	83,12	83,85	84,50	85,09	85,63
Выход бензина, м.д.	11,20	10,15	9,31	8,61	8,03	7,54
Выход бензина, %	89,97	85,40	81,41	77,89	74,76	71,93
Выход газа, м.д.	1,25	1,74	2,12	2,44	2,71	2,94
Выход газа, %	10,03	14,60	18,59	22,11	25,24	28,07

Таблица В.24 – Расчет расхода атомов водорода (кг/ч) в молекулах каждого вещества постоянной температуре 365°C и при различных объемах реактора

Компонент	Объем реактора, м ³					
	0,57	1,13	1,70	2,26	2,83	3,39
1	2	3	4	5	6	7
23 – диметилбутан	177,7	155,3	137,4	122,8	110,6	100,3
3 – метилпентан	229,5	200,1	176,9	157,9	142,1	128,7
2 – метилпентан	482,3	420,9	372,1	332,3	299,2	271,1
22 – диметилбутан	448,8	393,1	348,5	311,8	281,2	255,1
Метилциклопентан	390,4	348,4	313,8	284,6	259,6	237,8

Продолжение таблицы В.24

1	2	3	4	5	6	7
Циклогексан	114,6	102,8	92,9	84,5	77,3	70,9
н – Гексан	228,5	199,1	175,7	156,8	141,0	127,7
Водород	43,9	41,4	39,3	37,6	36,1	34,9
Бензол	511,7	536,3	555,8	571,7	584,8	595,9
Пропан	307,7	515,0	680,4	815,9	929,2	1025,4
Метан	1,2	2,2	3,0	3,8	4,4	5,0
Этан	5,7	7,6	9,2	10,5	11,8	12,9
н – Бутан	182,2	185,7	188,7	191,2	193,5	195,6
Этилен	0,6	0,6	0,5	0,4	0,4	0,4
Пропен	3,1	5,7	7,8	9,5	11,0	12,2
Бутен – 1	4,2	7,6	10,6	13,2	15,4	17,5
Этилбензол	103,6	110,2	115,9	120,8	125,2	129,1
Пентен – 1	5,2	9,5	13,2	16,5	19,3	21,9
н – Гептан	27,3	22,3	18,7	15,9	13,7	11,9
Толуол	231,7	236,3	239,7	242,2	244,2	245,8
2 – метилпентен	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Гексен – 1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
3 – метилпентен	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Выход бензина, кг/ч	2959,2	2748,2	2579,5	2441,0	2325,0	2226,3
Выход газа, кг/ч	540,7	751,8	920,5	1059,0	1175,0	1273,7
ОЧ · ст. конверсии	69,6	65,3	61,8	58,9	56,5	54,5

Приложение Г

(обязательное)

Основные параметры работы аппаратов узла фракционирования

Таблица Г.1 – Характеристика параметров работы основных аппаратов узла фракционирования и их продуктов

Наименование технологического параметра	Температура реакции, °С
	365
1	2
Колонна стабилизации	
Число тарелок	30
Тарелка питания, № с верха	15
Давление верха, МПа	1,32
Давление куба, МПа	1,51
Питание, кг/ч	3750,0
Температура входа, °С	120,0
Температура верха, °С	81,0
Температура куба, °С	166,0
Температура горячей струи, °С	190,0
Температура холодного орошения, °С	59,3
Конденсатор	
Температура в сепараторе, °С	45
Давление в сепараторе, МПа	1,32
Нагрузка по газу, кг/ч	477,7
Нагрузка по жидкости, кг/ч	708
Теплообменник стабильного катализата	
Температура входа, °С	122,5
Температура выхода, °С	200
Давление, МПа	0,21
Нагрузка по стабильному катализату, кг/ч	2564,3

Продолжение таблицы Г.1

1	2
Колонна стабилизации	
Число тарелок	30
Тарелка питания, № с верха	15
Давление верха, МПа	0,06
Давление куба, МПа	0,12
Питание, кг/ч	2564,3
Температура входа, °С	200,0
Температура верха, °С	127,0
Температура куба, °С	241,0
Температура горячей струи, °С	274,3
Температура холодного орошения, °С	31,3
Конденсатор	
Температура в сепараторе, °С	57,0
Давление в сепараторе, МПа	0,06
Нагрузка по газу, кг/ч	2365,1
Бензиновая фракция	
Температура, °С	35,0
Нагрузка, кг/ч	2365,1
Сжиженный газ	
Температура, °С	59,3
Нагрузка, кг/ч	708,0
Дизельная фракция	
Температура, °С	202,3
Нагрузка, кг/ч	199,2